

PEDRO SAMUEL GONÇALVES COELHO

**MODELOS HIERÁRQUICOS PARA A ANÁLISE E
SÍNTESE DE ESTRUTURAS E MATERIAIS COM
APLICAÇÕES À REMODELAÇÃO ÓSSEA**

Dissertação apresentada para obtenção do Grau de
Doutor em Engenharia Mecânica na especialidade de
Resistência dos Materiais pela Universidade Nova de
Lisboa, Faculdade de Ciências e Tecnologia.

LISBOA
2009

Aos meus Pais

Agradecimentos

Em primeiro lugar quero agradecer ao Criador a dádiva da vida. Agradeço aos meus familiares e amigos que sempre me apoiaram nos bons e maus momentos.

Esta dissertação teve como orientador o Professor Doutor Paulo Rui Alves Fernandes (DEM/IST/UTL) e como co-orientador o Professor Doutor João Mário Burguete Botelho Cardoso (DEMI/FCT/UNL). A ambos o meu agradecimento pela supervisão desta dissertação.

Em particular agradeço ao meu orientador a sua experiência na área da biomecânica do tecido ósseo e ao meu co-orientador a sua experiência no desenvolvimento de técnicas de processamento paralelo, das quais beneficiei muito para a elaboração desta dissertação. Outras ajudas tive que não posso aqui deixar de mencionar e dirigir o meu agradecimento conforme se segue.

Ao Professor Doutor Hélder Rodrigues (DEM/IST/UTL) estou-lhe grato pelo interesse e entusiasmo que sempre mostrou por esta dissertação e nas discussões elucidativas que tivemos sobre o tema da optimização. Ao Professor Doutor José Guedes (DEM/IST/UTL) também estou-lhe grato pelo tempo que me concedeu da sua atenção e ajuda nomeadamente no tema da homogeneização. Agradeço ao Professor Doutor Mário Secca (DF/FCT/UNL) pela motivação inicial que me deu na área da biomecânica. Ao Professor Doutor Miguel Neves (DEM/IST/UTL) agradeço o interesse demonstrado pela minha dissertação e ajudas pontuais.

No âmbito desta dissertação contactei com alguns investigadores no estrangeiro que de certo modo também me apoiaram na prossecução da mesma. Saliento os Professores Doutores Martin Bendsøe e Ole Sigmund da Danish Technical University (DTU-Lingby, Dinamarca) com os quais eu tive oportunidade de trocar ideias sobre optimização de topologia de estruturas e fazer o Ph.D.-course/Advanced school: Topology Optimization – Theory, Methods and Applications (Dinamarca em 2005). Acrescento o Professor Doutor Krister Svanberg (Royal Institute of Technology, Suécia) que me disponibilizou as fontes do seu

código MMA (Method of Moving Assymptotes) utilizado nesta dissertação. Agradeço ao Professor Doutor Pierre Duysinx (Université de Liège, Bélgica) a oportunidade de discutir alguns impasses relacionados com a convergência dos algoritmos de optimização e de ouvir sugestões práticas sobre como solucioná-los. Agradeço ao Professor Doutor Scott Hollister (University of Michigan, Ann Arbor, E.U.A.) a possibilidade de estagiar durante um mês (Maio de 2009) no seu laboratório para avaliar o potencial da aplicação do modelo hierárquico de remodelação óssea ao projecto de *scaffolds* para regeneração do tecido ósseo.

Gostaria também de agradecer ao Professor Doutor António Urgueira, na qualidade de coordenador da secção de Mecânica Estrutural, pela confiança que depositou em mim desde o princípio da minha actividade enquanto Assistente na secção de Mecânica Estrutural do DEMI/FCT/UNL.

Pelo companheirismo e troca de ideias agradeço aos meus colegas do DEMI/FCT/UNL: Professora Doutora Raquel Almeida, Mestre Carla Machado, Professor Doutor Daniel Vaz, Mestre Alberto Martinho, Professor Doutor Rui Martins, de entre outros.

Agradeço à Pollack Mihály Faculty of Engineering (University of Pécs, Hungary) por me ter atribuído o prémio “Young Researcher Best Paper Prize” no âmbito da conferência intitulada “The First International Conference on Parallel, Distributed and Grid Computing for Engineering, Pécs – Hungary, 6-8 April 2009” onde apresentei parte do trabalho desta tese resumida num artigo com o título “Parallel Computing Techniques Applied to the Simultaneous Design of Structure and Material”.

Agradeço à Fundação para a Ciência e a Tecnologia (Ministério da Ciência, Tecnologia e Ensino Superior, Portugal), por um lado, pelo projecto de investigação PTDC/EME-PME/71436/2006 e, por outro lado, pela concessão da Bolsa de Doutoramento com a referência SFHR/BD/25033/2005, possibilitando que me deslocasse a conferências e interagisse com equipas de investigação no estrangeiro.

Sumário

Esta dissertação aborda o tema da optimização de topologia hierárquica de estruturas tridimensionais. A topologia da estrutura definida na escala macroscópica e a microestrutura do material definida na escala microscópica são optimizadas de forma concorrente. Assume-se que a estrutura é feita de um material celular de microestrutura periódica, com propriedades elásticas equivalentes na escala macroscópica calculadas por homogeneização. Tipicamente, o problema é formulado como a maximização da rigidez sujeito a um constrangimento de volume global.

As soluções locais de material de rigidez maximizada satisfazendo unicamente requisitos de fracção volúmica podem não revelar características apropriadas para fabrico ou para aplicações específicas. Para contornar estas limitações, o espectro de aplicações do modelo hierárquico é ampliado de modo a poder incluir múltiplos constrangimentos locais de projecto e descreve-se uma estratégia algorítmica apropriada para lidar com esta complexidade acrescida. Os problemas locais de projecto do material podem ser resolvidos independentemente o que torna aliciante a utilização de técnicas de processamento paralelo para acelerar a obtenção de soluções. Alguns exemplos clássicos de estruturas são apresentados para evidenciar o potencial da optimização concorrente da estrutura e do material.

A satisfação de constrangimentos locais de projecto no modelo hierárquico é particularmente importante se a metodologia apresentada for aplicada à modelação de materiais naturais como o osso humano. Neste caso, a maximização da rigidez não é o único critério, mas são também considerados constrangimentos locais de cariz biológico que aproximam melhor as características morfométricas do osso e suas propriedades mecânicas equivalentes.

Um modelo hierárquico tridimensional para simulação do processo de adaptação óssea é apresentado com a introdução de constrangimentos locais relacionados com porosidade, densidade de área de superfície e permeabilidade. Condições de carga fisiológicas baseadas em medições experimentais são também levadas em conta neste modelo. O modelo proposto é capaz de calcular a distribuição de densidade aparente do osso à escala macroscópica. As

VIII

microestruturas obtidas caracterizam a anisotropia associada ao tecido ósseo compacto e trabecular.

O modelo de remodelação óssea proposto nesta dissertação representa uma nova aproximação computacional na previsão da adaptação óssea, quer na densidade aparente quer no comportamento mecânico da arquitectura trabecular. Portanto, este modelo pode representar uma ferramenta útil para o diagnóstico clínico de doenças como a osteoporose, para avaliar o comportamento do osso em presença de ambientes mecânicos modificados por introdução de próteses, para aumentar a compreensão da complexidade da estrutura óssea bem como para auxiliar o projecto de *scaffolds* em engenharia de tecidos.

Summary

The hierarchical topology optimisation of three-dimensional structures is addressed in this thesis. The structure lay-out defined at macroscale and the material microstructure defined at microscale are optimised concurrently. It is assumed that structure is made up of a periodic cellular material presenting equivalent elastic properties at macroscale computed by a homogenization technique. Typically, the problem is formulated as the compliance minimization subjected to a global volume fraction constraint.

Local material solutions with optimum stiffness satisfying only volume fraction requirements may not present appropriate features for fabrication or for specific applications. In order to address these limitations, this work extends the hierarchical model to handle multiple local constraints and describes an appropriate algorithm to solve it. Local material design problems can be solved independently and one takes advantage of this property by using parallel computing techniques to speed-up the solution task. Some structural examples are presented showing the potential of designing structure and material simultaneously.

The requirement for local material constraints in the hierarchical model is particularly important if the methodology is extended to model natural materials such as bone. In this case, the optimal stiffness is not the unique criterion, and biological local constraints should be considered for better simulation of the bone morphometric characteristics and equivalent mechanical properties.

A three-dimensional hierarchical model for bone tissue adaptation is presented allowing for the introduction of constraints at the micro-level related with porosity, surface area density and permeability. Physiological loading conditions based on experimental measurements are taken into account in the present model. Thus, this model is able to provide an apparent density distribution that fairly approximates the real femur bone at macroscale. At microscale the obtained microstructures characterize the local microstructure of compact and trabecular bone with the respective anisotropic properties.

The bone remodeling model proposed in this thesis represents a new approach to computational prediction of bone adaptation, both for apparent density and trabecular architecture mechanical behaviour. Thus, it can be a valuable tool to medical diagnoses, namely on osteoporosis, to predict bone adaptation to changes in the mechanical environment

X

due to the introduction of implants, to gain insight into the fine structure of bone as well as to support scaffolds design in tissue engineering.

Simbologia e Notações

Latim

\mathbf{a}, a_i	Perturbação suficientemente pequena em torno do valor zero.
\mathbf{b}, b_i	Vector das forças volúmicas.
$\bar{\mathbf{b}}$	Vector das forças volúmicas homogeneizado.
c	Parâmetro de penalidade na expressão da Lagrangeana Aumentada.
\mathbf{C}, C_{ijkl}	Tensor da flexibilidade.
\mathbf{C}^H, C_{ijkl}^H	Tensor da flexibilidade homogeneizado.
D	Dimensão característica do domínio macroscópico.
d	Dimensão característica do domínio microscópico.
\mathbf{e}, e_{ij}	Tensor das extensões.
\mathbf{e}', e'_{ij}	Tensor das extensões fixo.
E'	Utilizado como índice para se referir ao elemento finito macroscópico.
e'	Utilizado como índice para se referir ao elemento finito microscópico.
E^0	Módulo de elasticidade do material base da microestrutura.
\mathbf{E}^0, E_{ijkl}^0	Tensor da elasticidade ou rigidez do material base da microestrutura.
\mathbf{E}, E_{ijkl}	Tensor da elasticidade ou rigidez.
\mathbf{E}^H, E_{ijkl}^H	Tensor da elasticidade ou rigidez homogeneizado.
E_{NP}	Eficiência, medida de desempenho no cálculo paralelo.
F	Função objectivo global.
f	Função objectivo local.
F_x, R_x	Componente da força ou reacção segundo eixo x .
F_y, R_y	Componente da força ou reacção segundo eixo y .
F_z, R_z	Componente da força ou reacção segundo eixo z .
\mathbf{g}, g_i	Constrangimentos locais.
g_1	Função do constrangimento de perímetro ou densidade de superfície.

g_2	Função do constrangimento de permeabilidade.
\mathbf{g}', g'	Requisito no constrangimento local.
G	Módulo de corte do material base da microestrutura.
\hat{H}	Operador de convolução utilizado no filtro das sensibilidades.
\mathbf{h}, h_i	Constrangimentos locais de igualdade.
\mathbf{K}, K_{ij}	Matriz de permeabilidade.
\mathbf{K}^H, K_{ij}^H	Matriz de permeabilidade homogeneizada.
k	Factor custo metabólico de formação de osso.
$\ell_1 \ell_2$	Constantes de Lamé do material.
L	Função Lagrangeana.
M	Número máximo de elementos finitos na malha macroscópica.
m	Número máximo de elementos finitos na malha microscópica.
\mathbf{n}	Normal à superfície.
NP	Número de processadores.
p	Expoente de penalização no modelo SIMP.
P	Número de casos de carga no problema de optimização.
\mathbf{q}	Fluxo ou taxa de transferência por unidade de area.
Q	Taxa à qual certa quantidade é gerada (ou removida) por unidade de volume.
R_{ij}	Matriz de rotação.
r_{\min}	Raio que define a vizinhança utilizada no filtro das sensibilidades.
s_i	Coefficientes do polinómio interpolador.
S_v	Densidade de superfície.
S_{NP}	Aceleração, medida de desempenho no cálculo paralelo.
t	Contador de iterações.
\mathbf{t}	Vector da tracção exterior aplicada.
T_s	Tempo de execução do algoritmo em série.
T_n	Tempo de execução do algoritmo em paralelo.

\hat{u}	Campo de deslocamento que é solução do problema de equilíbrio macroscópico.
u^0	Primeiro termo da expansão assintótica para o deslocamento.
u^1	Segundo termo da expansão assintótica para o deslocamento.
\hat{u}	Constantes de integração em y .
v	Função de teste na formulação fraca ou variacional.
V^*	Limite superior para a fracção volúmica de material disponível no domínio macroscópico.
\mathbf{x}, x_i	Vector posição no domínio macroscópico.
\mathbf{x}^*	Ponto no domínio macroscópico (pode significar o óptimo).
\mathbf{y}, y_i	Vector posição no domínio microscópico.
Y	Domínio microscópico.
\nexists	Parte do domínio Y sólida ou fluída (vazio) conforme referido no texto.
z	Dimensão característica da malha de elementos finitos.

Grego

α_i	Pesos na formulação multicarga do problema de optimização.
β	Constante arbitrária.
γ	Factor multiplicativo no esquema de actualização das variáveis por um método de ponto fixo.
Γ_u	Fronteira do domínio macroscópico onde o deslocamento está imposto.
Γ_t	Fronteira do domínio macroscópico onde está aplicada uma tracção exterior.
$\Gamma_{\hat{q}}$	Fronteira do domínio macroscópico onde o fluxo está imposto.
Γ_ϕ	Parte da fronteira do domínio macroscópico onde o potencial está imposto.
Γ_J	Fronteira de descontinuidade (lados de cada elemento finito no caso do modelo numérico com discretização do domínio).
δ_{ij}	Delta de Kronecker.
$\delta\rho$	Variação da densidade macroscópica
$\delta\mu$	Variação da densidade microscópica
ε	Parâmetro de separação de escalas ou coeficiente homotético. Serve também como índice para se referir à associação com duas escalas de comprimento.
ζ	Número positivo pequeno.
η	Vector arbitrário.

θ_i	Ângulos de Euler.
κ	Permeabilidade imposta.
λ, λ_i	Multiplicador de Lagrange geral ou associado a um constrangimento local.
λ_1, λ_h	Multiplicador de Lagrange associado a um constrangimento local de volume.
λ_2, λ_g	Multiplicador de Lagrange associado a um constrangimento local g .
Λ	Multiplicador de Lagrange associado ao constrangimento global de volume.
Λ_0	Multiplicador de Lagrange associado ao constrangimento global de volume (valor inicial).
μ	Função densidade microscópica.
μ_{\min}	Constrangimento lateral inferior para a densidade microscópica.
ν	Coeficiente de Poisson do material base da microestrutura.
ξ	Limite móvel no esquema de actualização das variáveis por um método de ponto fixo.
ρ	Função densidade macroscópica (aparente).
ρ_{\max}	Constrangimento lateral superior para a densidade macroscópica.
ρ_{\min}	Constrangimento lateral inferior para a densidade macroscópica.
ρ^*	Limite superior fixo para a fracção volúmica de material disponível no domínio microscópico.
σ, σ_{ij}	Tensor das tensões.
φ	Potencial (pode representar um campo escalar como temperatura, pressão ou concentração).
$\tilde{\varphi}$	Constantes de integração em y .
ϕ	Vector potencial do problema local resolvido no domínio da célula unitária.
Φ	Densidade de energia de deformação.
χ, χ_i	Vector deslocamento do problema local resolvido no domínio da célula unitária. Relacionado com modos de deformação locais da célula.
$\hat{\chi}$	Campo de deslocamento que é solução do problema de equilíbrio microscópico.
ψ	Função arbitrária.
ω	Constante de pequeno valor que garante a diferenciabilidade da função do perímetro.
ϖ	Número de elementos finitos por aresta do domínio cúbico local Y .
Ω	Domínio macroscópico.
$\partial\Omega$	Fronteira do domínio macroscópico.

Operadores

$\langle \cdot \rangle$	Simbologia para se referir à média (média volumétrica de uma função, média aritmética ou média ponderada conforme referido no texto).
$\{ \}$	Salto de uma função na fronteira de descontinuidade Γ_j .
∇	Operador gradiente.
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	Derivada de Gâteaux

Abreviaturas

CONLIN	CONvex LINearization
DMO	Densidade Mineral Óssea
DXA	Dual X-ray Absortiomerty
EF	Elemento(s) Finito(s)
FEA	Finite Element Analysis
KKT	Karush-Kuhn Tucker conditions
KWR	Paciente chamado Walker
MEF	Método dos Elementos Finitos
MMA	Method of Moving Asymptotes
MPI	Message Passage Interface
NPA	Paciente tipo, <i>i.e.</i> , média dos resultados medidos para vários pacientes
OC	Optimality Criteria method
OP	Osteoporose
PCG	Preconditioned Gradient Method
SIMP	Solid Isotropic Material with Penalisation
μ -CT	Micro-Computing Topography

Índice de Matérias

Agradecimentos.....	V
Sumário.....	VII
Summary.....	IX
Simbologia e Notações.....	XI
Índice de Matérias.....	XVII
Índice de Figuras.....	XXI
Índice de Quadros.....	XXIX
Capítulo 1 – Introdução.....	1
1.1. Nota histórica sobre optimização estrutural.....	3
1.2. Objectivos, motivação e aplicações da dissertação.....	13
1.3. Estrutura da dissertação.....	14
Capítulo 2 – Optimização hierárquica de estruturas.....	17
2.1. Modelo material.....	17
2.2. Homogeneização.....	19
2.2.1. Problema de elasticidade.....	24
2.2.2. Problema de escoamento potencial.....	32
2.3. Formulação do problema de optimização hierárquica.....	37
2.4. Condições de óptimo do problema.....	40
2.5. Síntese de materiais.....	43
2.5.1. Maximização da rigidez do material.....	43
2.5.2. Maximização da permeabilidade do material.....	44
2.5.3. Constrangimentos de projecto na microestrutura.....	45
2.5.3.1. Perímetro/Superfície.....	45
2.5.3.2. Permeabilidade.....	47
2.5.4. Medida da anisotropia do material.....	48

2.6. Optimização hierárquica com constrangimentos locais.....	49
Capítulo 3 – Modelo numérico e algoritmos.....	55
3.1. Modelo numérico de elementos finitos.....	55
3.2. Estratégias algorítmicas de solução do problema hierárquico.....	58
3.2.1. Estratégias tipo I.....	58
3.2.1.1. Método do critério de optimalidade.....	59
3.2.1.2. Método das assíptotas móveis.....	62
3.2.2. Estratégias tipo II.....	65
3.2.2.1. MMA/OC.....	67
3.2.2.2. MMA/CONLIN.....	68
3.3. Processamento paralelo.....	69
3.3.1. Computação paralela em optimização de topologia.....	70
3.3.2. Problemas que constituem grandes desafios.....	72
3.3.3. Algoritmo de optimização hierárquica paralelo.....	74
3.3.4. Análise de desempenho em cálculo paralelo.....	77
3.3.5. Clusters.....	78
3.3.5.1. Beowulf cluster.....	79
3.3.5.2. ISTcluster.....	80
Capítulo 4 – Exemplos de aplicação a estruturas mecânicas.....	83
4.1. Síntese de materiais celulares.....	83
4.1.1. Estados de extensão normal e de deformação de corte particulares.....	84
4.1.2. Influência da escolha da solução inicial.....	87
4.1.3. Influência da malha de elementos finitos.....	91
4.1.4. Influência do constrangimento de superfície.....	93
4.1.5. Influência do constrangimento de permeabilidade.....	94
4.2. Síntese concorrente da estrutura e do material.....	99
4.2.1. Restrições no volume de material.....	99
4.2.1.1. Viga em consola.....	99
4.2.1.2. Arco de Ponte.....	103
4.2.1.3. Caixa oblonga.....	106
4.2.1.4. Exemplos multicarga.....	107

4.2.2. Restrições de projecto da microestrutura.....	111
4.3. Comparação de estratégias algorítmicas.....	117
4.4. Escalabilidade do problema hierárquico.....	120
Capítulo 5 – Modelo hierárquico de remodelação óssea.....	125
5.1. Fundamentos biológicos.....	126
5.1.1. O esqueleto humano.....	126
5.1.2. Composição e estrutura do osso.....	127
5.1.3. O osso fémur.....	131
5.1.4. Remodelação óssea.....	134
5.1.5. Osteoporose.....	136
5.1.6. Implantes/Engenharia de tecidos.....	137
5.2. Modelos de remodelação óssea.....	143
5.2.1. Breve nota histórica.....	143
5.2.2. Modelos de remodelação recentes.....	145
5.3. Modelo hierárquico de remodelação óssea.....	148
5.3.1. Modelo material.....	148
5.3.2. Lei de remodelação óssea.....	149
5.3.3. Factores influentes na arquitectura interna do osso.....	153
5.3.3.1. Anisotropia do osso trabecular.....	156
5.3.3.2. Anisotropia e porosidade do osso cortical.....	157
5.3.3.3. Densidade da área de superfície de osso trabecular.....	158
5.3.3.4. Permeabilidade intertrabecular.....	161
Capítulo 6 – Aplicações à remodelação óssea.....	163
6.1. Modelo numérico do osso fémur.....	163
6.2. Cargas exteriores aplicadas.....	166
6.2.1. Modelo de carregamento tipo I.....	166
6.2.2. Modelo de carregamento tipo II.....	168
6.3. Distribuição de densidade aparente e microestruturas.....	174
6.3.1. Sem constrangimentos locais.....	174
6.3.2. Influência da porosidade e do tipo de carregamento.....	177
6.3.3. Influência da densidade de área de superfície.....	182

6.3.4. Influência da permeabilidade intertrabecular.....	186
6.4. Influência do factor custo metabólico e validação DXA.....	201
Capítulo 7 – Conclusões e desenvolvimentos futuros.....	211
Bibliografia.....	217
Anexo A – Resultados do capítulo 6.....	241

Índice de Figuras

Capítulo 2

Figura 2.1. Modelo material hierárquico a duas escalas.

Figura 2.2. Domínio heterogéneo e modelo de elementos finitos da microestrutura.

Figura 2.3. Modelo material de microestrutura periódica.

Figura 2.4. Ilustração do processo de homogeneização.

Capítulo 3

Figura 3.1. Malhas de elementos finitos: a) Domínio global (exemplo da viga em consola); b) Domínio local, com indicação das condições fronteira de periodicidade no deslocamento através da modelação por acoplamento de nós.

Figura 3.2. Fluxograma do algoritmo que utiliza o método do critério de optimalidade. Versões do algoritmo em série e paralelo. Fluxo principal de informação entre problemas global e local indicado pelo tracejado.

Figura 3.3. Fluxograma do algoritmo que utiliza o MMA (versão em série).

Figura 3.4. Fluxograma do algoritmo que utiliza o MMA/OC.

Figura 3.5. Fluxograma do algoritmo que utiliza o MMA/CONLIN.

Figura 3.6. Técnica de decomposição do domínio ilustrada com uma malha de elementos finitos 24×6 para o domínio de projecto de uma viga em consola.

Figure 3.7. Técnica de processamento paralelo usada para obter a solução dos problemas locais. Ilustração com o exemplo da viga em Arco de Ponte.

Figure 3.8. Fluxograma mostrando o funcionamento da estratégia algorítmica MMA/CONLIN na versão em paralelo.

Figure 3.9. Mini-centro de computação paralela na sala de computadores do LABMEST.

Figure 3.10. ISTcluster.

Capítulo 4

Figura 4.1. Projecto inicial do tipo caixa fechada para uma célula $20 \times 20 \times 20$. Densidade de 0.75 nas paredes e de 0.407 no interior. Fração volúmica de 50%. Material de base com $E = 210\text{GPa}$ e $\nu = 0.3$. Identificação do referencial cartesiano utilizado no domínio Y .

Figura 4.2. Maximização de rigidez da microestrutura considerando diferentes situações de carga normal $(e_{11}, e_{22}, e_{33}, e_{12}, e_{13}, e_{23}) \times 10^{-3}$: a) Triaxial ou hidrostática (1,1,1,0,0,0); b) Biaxial (0,1,0,0,0,0); c) Uniaxial (0,0,1,0,0,0).

- Figura 4.3.** Maximização de rigidez da microestrutura considerando diferentes situações de carga de corte ($e_{11}, e_{22}, e_{33}, e_{12}, e_{13}, e_{23}$) $\times 10^{-3}$: a) Em todos os planos cartesianos (0,0,0,1,1,1), (perspectivas oblíqua e isométrica na figura); b) Em dois planos cartesianos (0,0,0,1,0,1); c) Num plano cartesiano (0,0,0,0,0,1); d) Corte máximo num plano a 45° (1,-1,0,0,0,0); e) Casos *a* e *d* sobrepostos (1,-1,0,1,1,1).
- Figura 4.4.** Maximização da rigidez para caso multicarga (malha 30×30×30): a) Caso 1 ($\alpha_1 = 0.5$) é corte generalizado (amarelo) e caso 2 ($\alpha_2 = 0.5$) é corte máximo num plano a 45° (azul); b) Perspectiva oblíqua; c) Perspectiva isométrica.
- Figura 4.5.** Soluções iniciais (malha 30×30×30): a) **SI 1** – tipo caixa de paredes fechadas (ver figura 4.1). Variação linear da densidade com a distância ao centróide do cubo; b) **SI 2** – densidade máxima no centróide e mínima no vértice ($V = 38,5\%$); c) **SI 3** – densidade mínima no centróide e máxima no vértice ($V = 48\%$).
- Figura 4.6.** Convergência do projecto da microestrutura com o número de iterações partindo de soluções iniciais diferentes. Exemplo multicarga da figura 4.4a com pesos iguais ($\alpha_1 = \alpha_2 = 0.5$). Densidade de energia de extensão final, $S = 23985 \text{ J/m}^3$.
- Figura 4.7.** Convergência do projecto da microestrutura com o número de iterações partindo de soluções iniciais diferentes. Exemplo multicarga da figura 4.4a com pesos iguais ($\alpha_1 = 0.25$ e $\alpha_2 = 0.75$). Densidade de energia de extensão final, $S = 30688 \text{ J/m}^3$.
- Figura 4.8.** Convergência do projecto da microestrutura com o número de iterações partindo de soluções iniciais diferentes. Exemplo multicarga da figura 4.4a com pesos iguais ($\alpha_1 = 0.75$ e $\alpha_2 = 0.25$). Densidade de energia de extensão final, $S = 17112 \text{ J/m}^3$ (casos SI 1 e SI 3) e $S = 14409 \text{ J/m}^3$ (casos SI 2).
- Figura 4.9.** Maximização da permeabilidade material para uma fracção volúmica de 50%. Resultados para os casos SI 2 e SI 3, em cima e em baixo, respectivamente. a) Distribuição de densidade subtraindo 1/8 de célula (Vermelho – material, Azul – vazio); b) Região sólida do domínio local Y ; c) Padrão periódico da região sólida; d) Mesmo padrão periódico mas visto de topo.
- Figura 4.10.** Topologia de células de base obtidas para a maximização da rigidez para o caso hidrostático/triaxial de carga e diferentes fracções volúmicas V : a) Caso de carga e malha 20×20×20 utilizados; b) $V = 0.1$; c) $V = 0.2$; d) $V = 0.3$ ($\frac{3}{4}$ de célula); e) $V = 0.4$ ($\frac{3}{4}$ de célula); f) $V = 0.5$ ($\frac{3}{4}$ de célula).
- Figura 4.11.** Topologia de células de base obtidas para a maximização da rigidez para o caso hidrostático/triaxial de carga e diferentes fracções volúmicas V : a) Malha 50×50×50; b) $V = 0.15$; c) $V = 0.30$; d) $V = 0.45$.
- Figura 4.12.** Maximização da rigidez da microestrutura para um estado de extensão pontual arbitrário $e_{ij} = (2, 1.5, 1.5, 9, 4)$. Fracção volúmica $V = 0.5$. Discretização da malha de EF utilizada: a) 20×20×20; b) 30×30×30; c) 50×50×50.
- Figura 4.13.** Influência do constrangimento de área de superfície. Caso de carga hidrostática, malha 30×30×30 e fracção volúmica de 0.35: a) Projecto não constrangido (área de superfície = P^*); b) Projecto constrangido (área de superfície = $1.675 \times P^*$).
- Figura 4.14.** Influência do constrangimento de área de superfície. Caso de carga $e_{ij} = (-0.726, -0.143, +0.128, -0.719, +0.329, -0.988) \times 10^{-3}$, malha 30×30×30 e fracção volúmica de 0.35: a) Projecto não constrangido (área de superfície = P^*); b) Projecto constrangido (área de superfície = $2 \times P^*$).
- Figura 4.15.** Caso da figura 4.11b com constrangimento de permeabilidade mínima de 30% em cada uma das direcções cartesianas.

- Figura 4.16.** Constrangimento de permeabilidade mínima ortotrópica ($p_{min}=30\%$). Em cima: Caso de carga hidrostática; em baixo: Caso de carga biaxial. Domínios sólido e fluido representados à esquerda e direita, respectivamente. Malha $30 \times 30 \times 30$.
- Figura 4.17.** Constrangimento de permeabilidade mínima ortotrópica ($p_{min}=30\%$). Topo: corte generalizado; Centro: corte em 2 planos; Fundo: multicarga. Domínios sólido e fluido representados à esquerda e direita, respectivamente; perspectivas isométrica e oblíqua em cima e em baixo, respectivamente. Malha $30 \times 30 \times 30$.
- Figura 4.18.** Optimização de topologia de uma viga consola. Malha de elementos finitos utilizada e condições fronteira. Projecto obtido com o modelo SIMP.
- Figura 4.19.** Projecto compósito obtido com o modelo hierárquico: a) *Checkerboard* em evidência no modelo constituído por elementos hexaedros de 8 nós na escala macroscópica; b) Utilização de elementos de 20 nós na macroescala com consequente redução do efeito de *checkerboard*; c) Resultado da figura anterior fazendo a média dos valores de densidade nos nós.
- Figura 4.20.** Design compósito ao centro e as microestruturas obtidas para alguns elementos da macroescala seleccionados (padrões periódicos $3 \times 3 \times 3$).
- Figura 4.21.** Histórico de convergência do algoritmo MMA/OC: a) Função objectivo global; b) Violação do constrangimento de volume global; c) Multiplicador de Lagrange associado ao constrangimento de volume local em cada um dos elementos seleccionados; d) Evolução da densidade em cada elemento (extraído de Coelho *et al.*, 2007a).
- Figura 4.22.** Optimização de topologia do exemplo Arco de Ponte considerando modelo SIMP e duas situações de apoios diferentes: a) Simetria num plano e apoios simples na zona próxima da extremidade inferior; b) Simetria em dois planos e apoio simples nos nós da extremidade inferior.
- Figura 4.23.** Projecto compósito (média dos valores nodais da densidade): a) Simetria num plano e apoios simples perto da extremidade ($\frac{1}{4}$ roda da bicicleta); b) Simetria em dois planos e apoio simples nos nós da extremidade (banzo inferior).
- Figura 4.24.** Projecto compósito (densidade constante em cada elemento) e microestruturas (células de base) obtidas para alguns elementos finitos seleccionados no domínio da estrutura. Exemplo com simetria em dois planos e apoio simples nos nós da extremidade (ver fig. 22b).
- Figura 4.25.** História de convergência dos multiplicadores de Lagrange locais (à esquerda) e variação da densidade macroscópica (à direita) para os elementos seleccionados da figura 4.24 (estratégia MMA/CONLIN).
- Figura 4.26.** Optimização de topologia do exemplo caixa oblonga: a) Malha de elementos finitos e condições de fronteira aplicadas, extremidades encastradas, simetria no plano posterior e momento aplicado no centro; b) Projecto obtido com o modelo SIMP (média dos valores nodais da densidade).
- Figura 4.27.** Projecto obtido com o modelo SIMP depois de seleccionados os elementos com densidades entre 0.5 e 1: a) Vista oblíqua anterior; b) Vista oblíqua posterior.
- Figura 4.28.** Projecto compósito obtido com o modelo hierárquico. Representadas várias fatias do domínio da estrutura para compreensão da distribuição das densidades nas regiões do interior.
- Figura 4.29.** Optimização de topologia de uma viga simplesmente apoiada sujeita a duas cargas verticais. Projecto obtido com o modelo SIMP (média dos valores nodais da densidade): a) Cargas aplicadas simultaneamente (um caso de carga); b) Cargas aplicadas em separado (caso multicarga).

- Figura 4.30.** Projecto compósito obtido com o modelo hierárquico (média dos valores nodais da densidade): a) Cargas aplicadas simultaneamente (um caso de carga); b) Cargas aplicadas em separado (caso multicarga).
- Figura 4.31.** Viga consola sujeita a situação multicarga.
- Figura 4.32.** Distribuição da densidade macroscópica (média dos valores nodais da densidade).
- Figura 4.33.** Fatias do domínio da estrutura (representação discreta da densidade macroscópica). Elementos finitos macroscópicos seleccionados para representação de algumas microestruturas (representados padrões periódicos).
- Figura 4.34.** Projecto compósito e microestruturas representativas (superfície interior em destaque em baixo) obtidas com introdução de um constrangimento de superfície.
- Figura 4.35.** História das iterações: a) Função objectivo global (energia total de deformação); b) Sensibilidade da função objectivo global.
- Figura 4.36.** História das iterações para o valor da superfície e densidade macroscópica nas microestruturas dos EF seleccionados: a) Microestrutura E1, b) Microestrutura E2.
- Figura 4.37.** Distribuições de densidade macro e microscópica resultantes do projecto com constrangimento de permeabilidade na direcção normal ao plano da estrutura.
- Figura 4.38.** Distribuição da densidade macroscópica (média dos valores nodais da densidade).
- Figura 4.39.** Domínio da estrutura fatiado (representação média da densidade macro) com EF-macro seleccionados para representação de algumas microestruturas (representadas células de base e respectivos padrões periódicos).
- Figura 4.40.** Projecto compósito (médias nodais dos valores da densidade macroscópica). Estratégias algorítmicas por ordem crescente do valor da função objectivo (energia total de deformação): a) MMA/OC (11668 J), b) MMA (11698 J), c) MMA/CONLIN (11713 J), d) OC (11718 J)
- Figura 4.41.** Histórico da função objectivo (energia total de deformação, *strain energy*) para as estratégias algorítmicas: a) Tipo I: OC e MMA; b) Tipo II: MMA/OC e MMA/CONLIN.
- Figura 4.42.** Histórico da violação do constrangimento de volume global.
- Figure 4.43.** Distribuição de densidade macroscópica. Malhas: a) $16 \times 16 \times 1$, b) $24 \times 24 \times 1$.
- Figure 4.44.** Microestruturas obtidas nos EF seleccionados (malha global: $24 \times 24 \times 1$).
- Figure 4.45.** Análise de desempenho em cálculo paralelo do problema de optimização hierárquica. Exemplo Arco de Ponte considerando duas malhas de diferentes resoluções: a) $16 \times 16 \times 1$; b) $24 \times 24 \times 1$ (extraído de Coelho *et al.*, 2009a).
- Figure 4.46.** Medidas de aceleração e eficiência para o problema “Arco de Ponte” comparando resultados obtidos com duas malhas distintas. a) Aceleração; b) Eficiência (extraído de Coelho *et al.*, 2009a).

Capítulo 5

- Figura 5.1.** O corpo humano. a) Esqueleto com legenda de classificação dos ossos quanto à forma: longos (verde), pequenos (vermelho), planos (azul) e irregulares (amarelo); b) Planos e direcções anatómicas (extraído de Shipman *et al.*, 1985).
- Figura 5.2.** Caracterização da matriz óssea nos dois tipos de tecido ósseo, cortical e trabecular.

- Figura 5.3.** Vistas posterior e anterior do fêmur (esquerdo), extraído de Abrahams (2003).
- Figura 5.4.** Secção frontal do osso fêmur proximal evidenciando os tipos de tecido ósseo.
- Figura 5.5.** Ligações musculares do fêmur (extraído de Abrahams, 2003).
- Figura 5.6.** Variação da espessura de uma trabécula ao longo do processo de remodelação (extraído de Cowin, 2001).
- Figura 5.7.** Representação esquemática das várias etapas do processo de remodelação numa amostra de osso trabecular.
- Figura 5.8.** O ser humano biónico (Rigutti *et al.*, 2008).
- Figura 5.9.** a) Modelo sólido resultante da interpolação dos contornos de imagens obtidas por tomografia axial computadorizada (ampliação mostra a aproximação da superfície por facetas triangulares); b) Seccionamento do modelo superficial tendo em vista a construção camada por camada; c) Formas obtidas por impressão 3D; d) Exemplo de uma arquitectura interna com porosidade e interconectividade definidas pela repetição espacial periódica do poliedro de Kelvin (extraído de Coelho *et al.*, 2005).
- Figura 5.10.** a) Analogia de Ward em 1838; b) Analogia de Culmann-Meyer em 1867.
- Figura 5.11.** Resultados bidimensionais do modelo hierárquico. a) Secção coronal do fêmur proximal; b) Modelo computacional; c) Distribuição de densidade aparente; d) – l) Microestruturas (extraído de Coelho *et al.*, 2005).
- Figura 5.12.** a) Osso real às escalas macro e microscópica; b) Modelo material a duas escalas.
- Figura 5.13.** Secção coronal proximal da tibia ilustrando a influência de vários factores na arquitectura trabecular.
- Figura 5.14.** Imagens de osso trabecular obtidas através de Microscopia Electrónica de Varrimento para diferentes zonas anatómicas do fêmur proximal. Idealizações de microestrutura do osso dependendo do estado de tensão local e diferentes graus de anisotropia consequentes (Imagens de microscopia e de idealização de célula retiradas de Gibson, 1985).
- Figura 5.15.** Curvas da densidade de área de superfície de osso S_v [mm^2/mm^3] a variar em função da densidade aparente de acordo com os trabalhos dos vários autores referenciados.
- Figura 5.16.** Permeabilidade como função da densidade assumindo $C = 0.022$ (Kohles and Roberts, 2002) e S_v é dada em Martin (1984): a) Representação de toda a função; b) Representação dos valores das ordenadas até 0.015 conforme visto em Herrera *et al.* (2008).

Capítulo 6

- Figure 6.1.** Modelo do osso fêmur: a) Curvas de nível e superfícies; b) Volumes.
- Figure 6.2.** Modelo de elementos finitos do osso fêmur (esquerdo) com diferentes vistas representadas: a) Anterior; b) Lateral; c) Posterior; d) Medial; e) Isométrica; f) Anterior-posterior combinada com superior-inferior e cortes em fatias para visualização do interior.
- Figura 6.3.** Volume [mm^3] dos elementos finitos da malha do modelo do osso fêmur.
- Figura 6.4.** Modelo numérico do osso fêmur proximal com indicação das forças exteriores aplicadas (resultante e componentes) nas partes da junta articular e músculos, casos de carga: a) Primeiro pico de força do ciclo de marcha normal (MN); b) Segundo pico do ciclo MN; c) Pico de força na situação de subir escadas.

- Figura 6.5.** Informação contida no CD-ROM HIP98 (Bergmann, 1998): a) Vídeo de paciente instrumentado com prótese da anca para avaliação das cargas na actividade de andar normalmente; b) Medições durante a actividade de subir escadas; c) Curva típica do ciclo de marcha humana.
- Figura 6.6.** Direcção e intensidade (comprimento do vector) das forças aplicadas na cabeça do fémur (esquerdo): a) Vista anterior-posterior; b) Vista medial-lateral; c) Vista superior-inferior; d) Isométrica.
- Figura 6.7.** Modelo numérico do osso fémur (esquerdo) com condições de fronteira de força/pressão imposta na cabeça do fémur e deslocamento imposto na base da diáfise para o caso de carga 2 (primeiro pico de força na situação de andar normal). Representadas várias vistas: a) Isométrica; b) Anterior-posterior; c) Medial-lateral; d) Superior-inferior.
- Figura 6.8.** Modelo numérico do osso fémur (esquerdo) com condições de fronteira de força/pressão imposta na cabeça do fémur e deslocamento imposto na base da diáfise para o caso de carga 7 (primeiro pico de força na situação de subir escadas). Representadas várias vistas: a) Isométrica; b) Anterior-posterior; c) Medial-lateral; d) Superior-inferior.
- Figura 6.9.** Distribuição de densidade aparente; a) Malha de EF do fémur; b) Secção intermédia do fémur; c) Secção proximal vista no plano π e selecção de EF (ver Coelho *et al.*, 2007c).
- Figura 6.10.** Microestruturas vistas nos EF seleccionados da figura anterior (ver Coelho *et al.*, 2007c).
- Figura 6.11.** Microestruturas e representação da respectiva anisotropia para as regiões (EF) anatómicas seleccionadas (neste caso a anisotropia é baixa).
- Figura 6.12.** Microestruturas e representação da respectiva anisotropia para as regiões (EF) anatómicas seleccionadas (neste caso a anisotropia é elevada).
- Figura 6.13.** Densidade aparente; vistas: a) Isométrica; b) Lateral; c) Coronal (ver Coelho *et al.*, 2007d).
- Figura 6.14.** Distribuição de densidade aparente e visualização de microestruturas para os elementos finitos seleccionados (ver Coelho *et al.*, 2007d).
- Figura 6.15.** Soluções de microestrutura para o osso compacto (ver Coelho *et al.*, 2007d).
- Figura 6.16.** Medidas de anisotropia para o osso compacto. Resultados obtidos através do modelo hierárquico e através de experimentação. Esquematização da hipótese de material base sólido e isotrópico para a matriz mineralizada do osso compacto.
- Figura 6.17.** Esquema da hipótese de material base sólido e isotrópico para o tecido ósseo trabecular.
- Figura 6.18.** a) Malha de EF global. Distribuição de densidade aparente (média dos valores nodais). Diferentes vistas: b) Posterior-anterior; c) Anterior-posterior; d) Medial-lateral; e) Lateral-medial; f) Secção intermédia coronal ou frontal.
- Figura 6.19.** Varrimento do campo de densidade aparente na zona proximal do modelo do osso fémur.
- Figura 6.20.** Vista da secção intermédia coronal: a) Distribuição de densidade **sem** controlo de superfície; b) Distribuição de densidade **com** controlo de superfície (vista tridimensional da diáfise para identificação da cavidade medular); c) Distribuição de superfície quando esta é controlada (extraída de Coelho *et al.*, 2009b).
- Figura 6.21.** Microestruturas obtidas em diferentes localizações anatómicas. Resultados **com** controlo de superfície (extraída de Coelho *et al.*, 2009b).
- Figura 6.22.** Microestruturas obtidas nos elementos finitos seleccionados **sem** controlo de superfície (extraída de Coelho *et al.*, 2009b).

- Figura 6.23.** Contagem do número de elementos finitos macroscópicos [%] existentes dentro de cada um dos sub-intervalos da densidade relativa macroscópica (extraída de Coelho *et al.*, 2009b).
- Figura 6.24.** Gráfico de densidade de área de superfície de osso [mm^2/mm^3] em função da fracção volumica: a) Curvas da literatura e a usada nesta dissertação para controlo da superfície (a negrito); b) Resultados numéricos com e sem controlo de superfície (extraída de Coelho *et al.*, 2009b).
- Figura 6.25.** Funções utilizadas para definir o requisito mínimo da permeabilidade como função da densidade aparente.
- Figura 6.26.** Distribuição da densidade aparente: a) Sem constrangimento de permeabilidade; b) Permeabilidade mínima dada por f_1 ; c) Permeabilidade mínima dada por f_2 ; d) Permeabilidade mínima dada por f_3 (funções $f_i, i=1, \dots, 3$ definidas na figura 6.25).
- Figura 6.27.** Comparação dos resultados de distribuição de permeabilidade (componentes K_{ii}) entre as situações de problema não constrangido (imagem da esquerda) e constrangido na permeabilidade com função f_2 (imagem da direita): a) Componente K_{11} ; b) Componente K_{22} ; c) Componente K_{33} .
- Figura 6.28.** Distribuição da densidade de área de superfície de osso em função da densidade aparente para as diferentes funções f_i de permeabilidade mínima consideradas: a) Sem constrangimento de permeabilidade; b) Com função de permeabilidade mínima f_1 ; c) Com função f_2 ; d) Com função f_3 .
- Figura 6.29.** Funções polinomiais interpoladoras das distribuições de densidade de área de superfície trabecular mostradas na figura 6.28: a) Com função de permeabilidade mínima f_1 ; b) Com função f_2 ; c) Com função f_3 ; d) Todas as funções interpoladoras são comparadas com a curva de Martin (1984).
- Figura 6.30.** Gráfico das componentes da diagonal do tensor da permeabilidade em função da densidade aparente: a) Sem constrangimento de permeabilidade; b) Com função de permeabilidade mínima f_1 ; c) Com função f_2 ; d) Com função f_3 .
- Figura 6.31.** Limites teóricos para a permeabilidade isotrópica segundo Hashin-Shtrikman (1962).
- Figura 6.32.** Gráfico da norma das componentes da diagonal do tensor da permeabilidade em função da densidade aparente: a) Sem constrangimento de permeabilidade; b) Com função de permeabilidade mínima f_1 ; c) Com função f_2 ; d) Com função f_3 .
- Figura 6.33.** Contagem do número de elementos finitos macroscópicos [%] existentes dentro de cada um dos sub-intervalos da densidade aparente: a) Com função de permeabilidade mínima f_1 ; b) Com função f_2 ; c) Com função f_3 .
- Figura 6.34.** Selecção de elementos finitos macroscópicos para análise e visualização dos resultados ao nível da microestrutura.
- Figura 6.35.** Representação gráfica da anisotropia em alguns elementos finitos macroscópicos seleccionados na figura 6.34. Da esquerda para a direita são apresentadas diferentes vistas do mesmo gráfico de anisotropia. De cima para baixo os gráficos correspondem à anisotropia medida nos elementos 774, 768, 1753, 1837 e 1923, respectivamente.
- Figura 6.36.** Comparação qualitativa entre exames DXA e resultados numéricos obtidos variando k : a) Exame DXA em cima mostra osso saudável (compara-se com $k = 550$) e em baixo mostra osso osteoporótico (compara-se com $k = 3100$); b) Resultados numéricos da densidade aparente para diferentes valores do parâmetro custo metabólico k (massa óssea em % e vistas da secção média coronal), extraída de Coelho *et al.* (2009b).
- Figura 6.37.** Variação da microestrutura com o aumento do custo metabólico k (da esquerda para a direita em cada elemento finito seleccionado).

Figura 6.38. Distribuição da densidade aparente para diferentes valores do factor custo metabólico k correspondentes a diferentes fracções volúmicas: a) 35%; b) 40%; c) 45%; d) 50%; e) 55%; f) 60%.

Figura 6.39. Selecção de EF para a análise e visualização dos resultados ao nível da microestrutura.

Figura 6.40. Funções polinomiais interpoladoras das distribuições de densidade de área de superfície trabecular mostradas na figura A7 para diferentes valores da fracção volúmica global (diferentes k 's): 35%, 40%, 45%, 50%, 55% e 60%.

Anexo A

Figura A.1. Gráficos de anisotropia para microestrutura do elemento 768. De cima para baixo valores de k para as fracções volúmicas de 35%, 40%, 45%, 50%, 55% e 60%. Da esquerda para a direita, perspectiva isométrica e vistas laterais (planos cartesianos).

Figura A.2. Gráficos de anisotropia para microestrutura do elemento 774. De cima para baixo valores de k para as fracções volúmicas de 35%, 40%, 45%, 50%, 55% e 60%. Da esquerda para a direita, perspectiva isométrica e vistas laterais (planos cartesianos).

Figura A.3. Gráficos de anisotropia para microestrutura do elemento 1753. De cima para baixo valores de k para as fracções volúmicas de 35%, 40%, 45%, 50%, 55% e 60%. Da esquerda para a direita, perspectiva isométrica e vistas laterais (planos cartesianos).

Figura A.4. Gráficos de anisotropia para microestrutura do elemento 1837. De cima para baixo valores de k para as fracções volúmicas de 35%, 40%, 45%, 50%, 55% e 60%. Da esquerda para a direita, perspectiva isométrica e vistas laterais (planos cartesianos).

Figura A.5. Gráficos de anisotropia para microestrutura do elemento 1923. De cima para baixo valores de k para as fracções volúmicas de 35%, 40%, 45%, 50%, 55% e 60%. Da esquerda para a direita, perspectiva isométrica e vistas laterais (planos cartesianos).

Figura A.6. Representação gráfica das componentes E^H_{1111} , E^H_{2222} e E^H_{3333} do tensor da permeabilidade homogeneizado como função da densidade aparente para diferentes valores da fracção volúmica global (diferentes k 's): a) 35%; b) 40%; c) 45%; d) 50%; e) 55%; f) 60%.

Figura A.7. Representação gráfica da densidade de área de superfície trabecular [mm^2/mm^3] como função da densidade aparente para diferentes valores da fracção volúmica global (diferentes k 's): a) 35%; b) 40%; c) 45%; d) 50%; e) 55%; f) 60%.

Figura A.8. Representação gráfica das componentes da diagonal do tensor da permeabilidade como função da densidade aparente para diferentes valores da fracção volúmica global (diferentes k 's): a) 35%; b) 40%; c) 45%; d) 50%; e) 55%; f) 60%.

Figura A.9. Representação gráfica da norma das componentes da diagonal do tensor da permeabilidade como função da densidade aparente para diferentes valores da fracção volúmica global (diferentes k 's): a) 35%; b) 40%; c) 45%; d) 50%; e) 55%; f) 60%.

Figura A.10. Representação gráfica do número de elementos finitos macro [%] existentes dentro de cada sub-intervalo da densidade aparente.

Índice de Quadros

Capítulo 2

Tabela 2.1. Significados de φ e \mathbf{K} dependendo do problema físico.

Capítulo 4

Tabela 4.1. Tensores da permeabilidade do material considerando maximização da rigidez com ou sem constrangimento de permeabilidade isotrópica e diferentes casos de carga.

Tabela 4.2. Variação da rigidez e superfície do material quando o constrangimento de permeabilidade ortotrópica é considerado e para diferentes casos de carga.

Tabela 4.3. Permeabilidades k_{ij} medidas no problema não constrangido (ver figura 4.32).

Tabela 4.4. Permeabilidades k_{ij} medidas no problema constrangido (ver figura 4.38).

Capítulo 6

Tabela 6.1. Modelo de carregamento I. Resultante das forças aplicadas e respectivas componentes para a junta articular e músculos.

Tabela 6.2. Modelo de carregamento II. Resultante das forças aplicadas e respectivas componentes para a junta articular e músculos para cada caso de carga. Posição no ciclo de marcha (em %).

Tabela 6.3. Reacções às forças/pressões aplicadas na cabeça do fémur em cada um dos casos de carga.

Tabela 6.4. Coeficientes dos polinómios de interpolação das densidades de área de superfície de osso representados graficamente na figura 6.29.

Tabela 6.5. Caracterização do tensor da permeabilidade nos elementos finitos macroscópicos seleccionados da figura 6.34.

Tabela 6.6. Visualização da microestrutura obtida nos elementos finitos macroscópicos seleccionados na figura 6.34. Sem constrangimento de permeabilidade mínima.

Tabela 6.7. Visualização da microestrutura obtida nos elementos finitos macroscópicos seleccionados na figura 6.34. Com constrangimento de permeabilidade mínima dado por f_2 .

Tabela 6.8. Resultados de fracção volúmica, densidade de superfície, permeabilidade e rigidez para algumas microestruturas seleccionadas. Para cada microestrutura os resultados são apresentados para diferentes valores do parâmetro custo metabólico k associados a diferentes fracções volúmicas globais: 35%, 40%, 45%, 50%, 55% e 60%.

Tabela 6.9. Coeficientes dos polinómios de interpolação das densidades de área de superfície de osso representados graficamente na figura A7.

Anexo A

Tabela A.1. Microestruturas em cada um dos elementos seleccionados na figura 6.39 e para diferentes valores do parâmetro k (diferentes percentagens de fracção volúmica global).

Capítulo 1

Introdução

A análise e síntese de estruturas e materiais constitui o tema de fundo desta dissertação de doutoramento. A expressão “análise e síntese” recupera a fraseologia utilizada nos trabalhos que foram considerados pioneiros para a era moderna da optimização estrutural (Schmit 1960, 1964; Schmit e Mallet, 1963; Gellatly *et al.* 1964; Gellatly e Gallagher 1965, 1966; Schmit e Fox 1965; Przemieniecki 1968).

Por “análise” estrutural entende-se a obtenção da resposta (*e.g.*, deslocamentos ou tensões) de uma estrutura sujeita a cargas exteriores aplicadas. Os métodos de análise estrutural podem ser divididos em dois grupos, métodos analíticos e métodos numéricos. Estes últimos apresentam maior potencial de aplicação a estruturas complexas e, por sua vez, podem dividir-se em dois tipos (ver Przemieniecki, 1968): (1) solução numérica de equações diferenciais para os deslocamentos ou tensões; (2) métodos matriciais baseados numa discretização por elementos finitos (métodos variacionais). No primeiro tipo, as equações da elasticidade são resolvidas para uma configuração particular da estrutura por técnicas de diferenças finitas ou por integração numérica directa. No segundo tipo, o domínio contínuo ocupado pela estrutura é substituído por um modelo matemático constituído por elementos da estrutura de tamanho finito (elementos estruturais finitos ou discretos) com propriedades calculadas através da teoria da elasticidade dos meios contínuos e que podem ser expressas na forma matricial. Para cada elemento é assumida uma forma de distribuição dos deslocamentos ou tensões (linear, quadrática, etc). Posto isto, a estrutura é idealizada como uma assemblagem destes elementos discretos e a resposta da estrutura completa é obtida por combinação das distribuições aproximadas de deslocamento ou tensão individuais (de cada elemento) de modo a ser satisfeito o equilíbrio das forças e a compatibilidade dos

deslocamentos nas ligações dos elementos. Com a diminuição das dimensões daqueles elementos discretos assiste-se a uma convergência do campo de deformação do modelo matemático para aquele verificado no domínio real contínuo da estrutura. Tipicamente, a resposta da estrutura é a solução de um sistema de equações lineares (pós-asseblagem) cujas incógnitas são os deslocamentos (método da rigidez ou dos deslocamentos). Os métodos matriciais como o Método dos Elementos Finitos (MEF) são apropriados e recomendados para a análise de estruturas complexas.

Por “síntese” estrutural entende-se a geração automática de uma estrutura para projectá-la da forma mais eficiente segundo determinado critério de projecto (projecto óptimo). Por exemplo, um problema clássico consiste em determinar as dimensões dos componentes de uma estrutura de modo a minimizar o seu peso global levando em conta constrangimentos de tensão, deslocamento ou estabilidade. Síntese estrutural envolve, portanto, um custo computacional acrescido na medida em que requer uma sequência de análises (série de iterações de projecto). Para tornar viável este processo, sobretudo na aplicação a estruturas complexas, há necessidade de recorrer a um procedimento de projecto automático com recurso a computadores. Basicamente, a síntese/optimização estrutural surgiu fundada no desenvolvimento dos três seguintes importantes pilares: (1) tecnologia dos computadores, (2) teoria das estruturas recorrendo ao cálculo matricial e (3) investigação operacional (programação matemática linear, LP¹ e não-linear, NLP²).

O trabalho desenvolvido nesta dissertação coloca ênfase na modelação multiescala, i.e., a análise e síntese concorrente da estrutura e do material utilizado na sua construção. Em problemas de optimização “clássicos”, envolvendo apenas uma escala, o objectivo de melhorar uma medida de desempenho da estrutura é concretizado através da alteração das suas dimensões, configuração ou topologia (*lay-out*) mas mantendo-se o material de base, tipicamente sólido linear isotrópico (*e.g.* aço, alumínio, etc). O problema abordado nesta dissertação não só leva em conta o projecto da “melhor” estrutura, mas também o projecto do “melhor” material de que esta é constituída em cada ponto do seu domínio. Isto possibilita uma melhoria adicional de desempenho da estrutura para um determinado critério de projecto. A designação de “modelos hierárquicos” no tema da dissertação refere-se a uma hierarquia de escalas de comprimento, escalas macro e microscópica identificadas com os domínios de projecto da estrutura e do material, respectivamente. Poder-se-ia classificar o problema aqui

¹ *Linear Programming*

² *Non-Linear Programming*

abordado como problema de optimização de topologia ou de distribuição de material a duas escalas. O interesse por este tipo de modelos tem vindo a aumentar em diversos domínios científicos como, por exemplo, biomecânica do tecido ósseo. O osso, assim como a madeira ou a cortiça, pertence à classe dos materiais naturais hierárquicos daí que o modelo apresentado nesta dissertação seja explorado também com vista a um aprofundar do conhecimento sobre os processos naturais de adaptação/remodelação óssea.

O texto introdutório desenvolvido até este ponto teve por objectivo dar ao leitor uma compreensão geral do tema da dissertação. Tendo sido indicados os principais assuntos abrangidos nesta dissertação, a introdução ao tema continua de seguida, sendo dividida por três tópicos. O primeiro, em estilo de nota histórica, pretende fazer um estado da arte, sobretudo na parte dos modelos e métodos que têm surgido para a análise e síntese de estruturas e materiais. O estado da arte especificamente sobre os modelos de remodelação óssea é feito no capítulo da dissertação dedicado a este tipo de aplicação. O segundo tópico introdutório clarifica os objectivos, a motivação e aplicações da dissertação. O terceiro descreve e justifica a organização da dissertação.

1.1. Nota histórica sobre optimização estrutural

A optimização estrutural tem constituído um tópico de interesse por mais de 100 anos. Os primeiros trabalhos analíticos sobre optimização estrutural foram publicados por Maxwell (1890) e Michell (1904).

Durante a 2ª Guerra Mundial, nos finais da década de 1940 e início da década de 1950 as aplicações da optimização estrutural envolviam a minimização do peso de componentes usados na indústria aeronáutica como, por exemplo: colunas e painéis reforçados sujeitos a cargas de compressão.

Os computadores digitais surgiram no início da década de 1950 e deram um forte impulso neste período à aplicação dos métodos numéricos de Programação Linear (*e.g.* SIMPLEX), então desenvolvidos pela comunidade de Investigação Operacional. Estes métodos foram aplicados para resolver problemas de optimização estrutural envolvendo estruturas reticuladas (treliças). Nos finais da década de 1950, o interesse pela optimização estrutural foi grande na indústria aeroespacial devido à necessidade de projectar estruturas leves. Visto que os

4 INTRODUÇÃO

programas de exploração espacial estavam em ascensão neste período, recursos avultados foram aplicados em investigação nesta área.

Para além do avanço tecnológico ao nível da informática durante a década de 1950, sucederam-se avanços teóricos significativos na área dos métodos numéricos aplicados à mecânica estrutural. O surgimento da teoria dos Elementos Finitos, EF, (Clough, 1960) abriu pela primeira vez a possibilidade dos engenheiros projectistas realizarem a análise de estruturas verdadeiramente complexas.

Os desenvolvimentos acumulados até finais da década de 1950 encerravam um potencial enorme para a optimização estrutural, permitindo que esta conhecesse um franco progresso no período seguinte. O artigo de Schmit (1960) é considerado hoje em dia como o marco que separa os desenvolvimentos iniciais da optimização estrutural e a optimização estrutural moderna. Basicamente, este artigo adquiriu uma importância única no momento da sua publicação porque, por um lado, introduziu a ideia de combinar a análise estrutural por elementos finitos com os métodos numéricos de optimização e, por outro lado, demonstrou a viabilidade deste processo na resolução de problemas reais. Esta combinação veio revolucionar a metodologia do projecto óptimo de estruturas, tornando-o num processo automático eficiente (ver também Fox 1965).

A optimização estrutural moderna, como é reconhecida desde 1960 até aos nossos dias, tem sido marcada por sucessivos progressos conseguidos ao nível da teoria da optimização, métodos de optimização numéricos, hardware e software. Neste cenário de desenvolvimento, a optimização estrutural não se limitou apenas às indústrias aeronáutica e espacial, mas expandiu-se a um maior número de domínios: construção automóvel, produção de máquinas-ferramentas, construção civil e naval.

Anteriormente, referiu-se a resolução de problemas de Programação Linear especialmente na década de 1950. Os métodos de Programação Não Linear aplicados a problemas contínuos conheceram um desenvolvimento substancial nas décadas de 1970 e 1980. De entre estes métodos destacam-se a Programação Quadrática Sequencial (SQP – *Sequential Quadratic Programming*, Schittkowski 1985) pelo seu uso generalizado e o Método das Assíptotas Móveis (MMA – *Method of Moving Asymptotes*, Svanberg 1987) por revelar propriedades particularmente atraentes na solução de problemas com número elevado de variáveis de projecto como sucede na optimização de topologia de estruturas contínuas. Acrescente-se ainda que, existindo a necessidade do desenvolvimento de métodos com espectro de aplicação

mais alargado, a partir da década de 1980 houve um desenvolvimento substancial e entusiástico de métodos aplicáveis a problemas de optimização estrutural discretos e mistos. Em parte, este objectivo foi atingido pelas Meta-Heurísticas¹ (Glover 1986, Coelho 2003) que haviam sido desenvolvidas e aplicadas com sucesso a problemas de optimização combinatória no âmbito da Investigação Operacional.

A ideia básica da optimização estrutural consiste em determinar um conjunto de parâmetros de uma estrutura (as variáveis de projecto) de modo a minimizar ou maximizar uma função de custo (ou objectivo) sem a violação de determinados constrangimentos relacionados com a integridade estrutural.

A optimização estrutural pode ser classificada em três categorias principais: (1) optimização dimensional, (2) optimização de forma ou de configuração e (3) optimização de topologia ou *lay-out*. A natureza das variáveis de projecto (discreta, contínua ou booleana) pode diferir consoante a categoria. Para além destas três categorias principais, acresce-se também a optimização de material. Neste caso a geometria e dimensões da estrutura não são alterados. O objectivo é encontrar o material óptimo. Exemplos de variáveis de projecto são: as propriedades elásticas, a orientação das fibras de materiais compósitos e espessuras de camadas de laminados. Como trabalhos representativos deste tipo de problemas refiram-se Banichuk (1983) e Olhoff e Rozvany (1995). Em seguida, após uma breve descrição da primeira e segunda categoria referidas, dar-se-á mais ênfase nesta introdução ao estado da arte em optimização de topologia.

No início do período da optimização estrutural moderna, década de 1960, a optimização estrutural estava sobretudo orientada para a resolução de problemas de **optimização dimensional**. Num problema de optimização dimensional, as variáveis de projecto (inteiras ou reais) são frequentemente as dimensões das secções transversais dos membros da estrutura. A forma e topologia da estrutura mantêm-se fixas ao longo do processo de optimização. Exemplos de optimização dimensional contínua ou discreta envolvem a optimização: dos diâmetros das barras de treliças, das secções transversais de vigas, das espessuras de placas ou membranas, do número e orientação das lâminas de um material compósito, etc.

A **optimização de forma** começa a surgir em numerosas publicações no início da década de 1970 (Zienkiewicz e Campbell 1973; Haftka e Grandhi 1986). Embora mais complexa e

¹ Inclui técnicas tais como: Algoritmos Genéticos (*Genetic Algorithms*), Recozimento Simulado (*Simulated Annealing*), Pesquisa Tabu (*Tabu Search*), etc.

menos tratada, a optimização de forma combinada com a optimização dimensional pode conduzir a um desempenho da estrutura ainda melhor. Neste caso, a topologia da estrutura é fixa, mas considera-se variável a fronteira Γ delimitadora do domínio Ω ocupado pela estrutura. Esta fronteira pode ser definida por um conjunto de pontos, uma linha ou uma superfície. Essa linha ou superfície de fronteira pode ser modelada por funções matemáticas (*splines* ou outras) mediante a definição de pontos de controlo. As variáveis de projecto são então as coordenadas de posição desses pontos ao longo da fronteira. As variáveis de projecto na optimização de forma são contínuas e também são designadas por *variáveis geométricas*, dado o seu controlo sobre a geometria da fronteira. O objectivo da optimização de forma será encontrar o conjunto de valores das variáveis geométricas, ou seja, a forma óptima da fronteira Γ , que minimiza a função objectivo do problema. Por exemplo, no caso de uma treliça a variação da fronteira é realizada através da variação das coordenadas de posição dos nós implicando uma modificação do comprimento e orientação das barras. No entanto, a topologia da estrutura (número de nós, barras e conectividade entre os nós) mantém-se inalterada, pelo que, a solução final depende fortemente da topologia. Pode acontecer que a topologia de partida não seja óptima e como tal a solução final obtida será sub-óptima. A introdução de variáveis topológicas na optimização de estruturas pode ainda levar a uma melhoria adicional na medida de desempenho da estrutura.

A **optimização de topologia** de estruturas teve como pioneiro Maxwell (1890) que estudou analiticamente o caso de treliças estaticamente determinadas para um determinado número de cargas e condições de suporte. No entanto, só muito recentemente, a partir da década de 1980, este assunto viu reavivado o seu interesse com o trabalho de Bendsøe e Kikuchi (1988).

Tipicamente, a optimização topológica pode ser vista como um procedimento de optimização que distribui/redistribui racionalmente uma quantidade de material disponível, por uma área ou volume fixos, através da remoção gradual de pequenas porções de material em regiões onde a resposta da estrutura apresenta baixo nível de deformação em benefício de outras regiões sob maior deformação. Isto resulta numa distribuição de material mais eficiente para a passagem dos esforços internos contribuindo para uma maximização da rigidez global da estrutura. A estrutura resultante ocupará então uma parte do domínio inicial e poderá

apresentar-se perfurada ou com vazios de material. Este tipo de *lay-out* como solução óptima está caricaturado numa célebre frase: “The art of structure is where to put the holes”¹.

Para introduzir o conceito de optimização de topologia ou de *lay-out* de uma estrutura pode considerar-se o caso de uma treliça. Por exemplo, partindo-se de uma topologia inicial, a optimização topológica procura os nós necessários (de entre o conjunto de nós predefinido) e a conectividade entre estes no sentido de se obter a melhor distribuição de material, ou seja, aquela que minimiza o peso e satisfaz os constrangimentos de tensão, deslocamento ou encurvadura impostos. As conectividades entre os nós por meio de barras podem ser modeladas por variáveis booleanas (0 ou 1), que representam um estado de existência (1) ou ausência (0) de barras, ou então, por variáveis contínuas associadas às dimensões das áreas da secção transversal das barras, incluindo a possibilidade de barras com área nula. Este método de optimização topológica é conhecido por *Ground Structure Approach*, introduzido na década de 1960 (Dorn *et al.* 1964) e tipicamente aplicado a estruturas reticuladas.

No caso da optimização de topologia envolvendo problemas de elasticidade dos meios contínuos bidimensionais ou tridimensionais, pode aplicar-se um método que é conhecido por *Hard-Kill Optimization* (HKO) ou também conhecido por *Fully Stressed Design Technique*, ver Xie e Steven (1993). Considera-se que o domínio Ω da estrutura é um meio contínuo discretizado por uma malha fina de EF. Procede-se a uma análise de EF para o cálculo do campo de tensão (por exemplo, tensão equivalente de *Von-Mises*) nesse domínio. Em seguida, estabelece-se uma relação entre os resultados de tensão (ou de densidade de energia de deformação) e o módulo de elasticidade do material. Esta relação é expressa por uma função em degrau que determina, simplesmente, se um dado elemento finito faz ou não faz parte integrante da estrutura na análise seguinte de EF. Numa variante do método HKO designada por *Soft-Kill Optimization* (SKO) a relação entre a tensão e o módulo de elasticidade é linear, ver Walther e Mattheck (1993) e Baumgartner *et al.* (1992). A remoção gradual de material das zonas de baixa tensão através de sucessivas análises de EF conduz a uma minimização do peso até um critério de convergência ser satisfeito, por exemplo, todos os níveis de tensão serem maiores do que uma percentagem da tensão máxima (*fully stress design*, Gallagher 1977). Os métodos HKO e SKO não são considerados métodos de optimização convencional pois não aplicam critérios de optimalidade, mas em vez disso são baseados em heurística. Estes métodos estão na base dos métodos evolucionários conhecidos por *Evolutionary Fully*

¹ Frase atribuída ao arquitecto Robert Le Ricolais (1894-1977).

Stressed Design Technique ou, de forma mais geral, *Evolutionary Structural Optimization* (ESO), ver Hinton e Sienz (1995); Xie e Steven (1997); Li *et al.* (2000); Papadrakakis *et al.* (2001); Steven *et al.* (2002); Huang e Xie (2008); Rozvany (2009).

A optimização topológica é na sua génese um problema inteiro ou discreto, representado por variáveis booleanas que expressam a existência de material (1) ou a ausência de material (0). Um problema com estas características não pode ser resolvido por métodos de programação matemática, mas pode ser resolvido recorrendo a programação inteira ou a meta-heurísticas (métodos sem gradiente; Hajela e Lee, 1995). No entanto, é digno de nota que, por um lado, os algoritmos exactos conhecidos para optimização inteira são ineficientes para um grande número de variáveis de projecto como acontece em optimização de topologia e por outro lado, a remoção discreta de material corresponde ao aparecimento de furos na estrutura o que pode implicar uma análise por EF numericamente instável.

O modelo de optimização topológica que utiliza uma distribuição de material com densidade (fracção volumica) variável (material compósito), foi encarado com muito entusiasmo em optimização topológica por permitir a relaxação do problema discreto, transformando-o num problema contínuo (Rozvany *et al.* 1995). Uma contribuição significativa na utilização de um modelo de material compósito em optimização topológica de estruturas foi dada por Bendsøe e Kikuchi (1988). Estes investigadores desenvolveram um método designado por *método de homogeneização* que consiste em preencher o domínio ocupado pela estrutura com um modelo de material compósito de microestrutura periódica com propriedades elásticas calculadas pela teoria matemática da homogeneização (secção 2.2). Especificamente, este compósito é descrito a partir de uma célula de base quadrada (de orientação variável) com um furo de geometria rectangular que ao ser repetida no espaço gera um material poroso do tipo celular periódico. As variáveis de projecto do problema de optimização são as dimensões do furo da célula que caracterizam a microestrutura e definem, em cada ponto do espaço, um material poroso cuja densidade relativa toma valores contínuos no intervalo $[0,1]$. O valor 1 corresponde a célula cheia de material (furo inexistente), o valor 0 corresponde a célula com vazio de material (furo de dimensão máxima) e todos os valores intermédios correspondem a um material celular de densidade relativa intermédia. O problema de optimização de topologia assim posto é definido como a procura da estrutura mais rígida variando a distribuição da porosidade (ou densidade) do material no domínio da estrutura.

Outro método de optimização de topologia baseado num modelo material também de densidade variável é designado por SIMP (*Solid Isotropic Material with Penalization*). Por vezes, este método também é designado de *material interpolation, artificial or fictitious material, power law* ou *artificial density approach*. A ideia básica deste método foi proposta por Bendsøe (1989) e o termo foi introduzido mais tarde por Rozvany *et al.* (1992). Este método relaciona o tensor da elasticidade E_{ijkl} , em cada ponto x do domínio Ω da estrutura, com um tensor de elasticidade E^0_{ijkl} de um material base sólido e isotrópico através de uma lei de potência que toma como argumento a função densidade $\rho(x) \in]0,1]$ e expoente p . Nesta relação de rigidez, um expoente $p > 1$ tem como efeito penalizar os valores intermédios da densidade, $0 < \rho < 1$, levando a uma caracterização final do domínio Ω através de regiões de material ($\rho = 1$) e vazio ($\rho = 0$). O trabalho de Bendsøe e Sigmund (1999) fornece uma interpretação física para as soluções compósitas ($0 < \rho < 1$) atribuídas ao modelo SIMP. Aqui, conclui-se que, sob determinadas condições de penalização ($p > 3$ em problemas 2D e 3D), qualquer tensor E_{ijkl} obtido com o modelo SIMP pode ser fisicamente interpretado como um tensor da elasticidade de um material compósito feito de vazio e uma quantidade do material base correspondente à fracção volúmica dada por ρ . No entanto, no contexto do modelo SIMP, a variação da densidade do material não deve ser confundida com a optimização de material, pois o objectivo não é obter as propriedades óptimas do material sob determinadas condições. Pretende-se, unicamente, identificar o domínio ocupado pela estrutura.

Nesta dissertação aplicam-se essencialmente os métodos de homogeneização e SIMP. No entanto, acrescenta-se ainda que existem outros métodos utilizados em optimização de topologia, tais como: métodos baseados na derivada topológica, *Bubble method, level-set method* (e.g. Eschenauer *et al.* 1994; Barbarosie e Toader 2009a, 2009b; Sokolowski e Zochowski 1999; Sethian e Wiegman 2000; Allaire *et al.* 2002, 2004; Wang *et al.* 2003b, 2004, Norato *et al.* 2007). Existe também uma abordagem de projecto livre do material (*free material design*) que consiste na parametrização livre do tensor da elasticidade, i.e., as variáveis de projecto são as constantes elásticas desse tensor em cada ponto do domínio da estrutura (Ringertz 1993; Bendsøe *et al.* 1994).

Entre os vários métodos referidos anteriormente, aquele que tem sido mais popular e divulgado em implementações de optimização de topologia em códigos de EF é o método SIMP. Porém, a introdução explícita de modelos de material compósito (materiais com microestrutura) na optimização de topologia aplicando o método de homogeneização revela

um potencial de aplicações ainda mais alargado e interessante, i.e., abre naturalmente o caminho para a análise/síntese do próprio material de que é concebida a estrutura (Olhoff 1996, Eschenauer e Olhoff 2001, Bendsøe e Sigmund 2003). O interesse pelo projecto óptimo de materiais compósitos em aplicações de engenharia (automóvel, aeroespacial, civil, etc) reside no facto destes materiais apresentarem rigidez elevada e peso reduzido ou outras propriedades específicas (absorção de energia, isolamento térmico, comportamento sob impacto) melhoradas comparativamente às propriedades dos materiais constituintes do compósito quando isolados. De entre os diversos tipos de materiais compósitos passíveis de se fabricar, esta dissertação concentra-se numa classe específica de compósitos celulares de microestrutura periódica para os quais a teoria matemática de homogeneização pode ser aplicada para calcular as propriedades mecânicas (secção 2.2). O interesse por esta classe particular de compósitos reside no facto adicional de permitirem modelar ou aproximar materiais naturais (por exemplo, o caso do osso humano) como materiais de microestrutura quase periódica ou localmente periódica. O capítulo 5 desta dissertação desenvolve este tipo de modelação.

Alguns trabalhos aplicam uma técnica designada por *homogeneização inversa* que consiste em projectar um material de microestrutura periódica com determinadas propriedades alvo ou com uma medida de desempenho optimizada, por exemplo, a rigidez estrutural (Neves *et al.* 2000, 2002; Gibiansky e Sigmund 2000; Sigmund 1994, 1995, 1999, 2000; Sigmund e Torquato 1997, Guedes *et al.* 2003, Paulino *et al.* 2008; Diaz e Bernard 2003, Barbarosie e Toader 2009b). Nestes casos o problema de distribuição de material cinge-se ao domínio do menor elemento repetido ou periódico (célula de base). As propriedades na macroescala (padrão periódico) são determinadas por homogeneização e os resultados podem ser comparados com limites teóricos de rigidez obtidos para certos casos particulares, por exemplo, isotropia ou simetria cúbica (Hashin e Shtrikman 1963; Cherkaev e Gibianski 1993, 1996; Lipton e Northrup 1994).

Outros trabalhos vão além do projecto isolado do material ou da estrutura. Consideram o problema multiescala caracterizado pela distribuição eficiente do material no domínio da estrutura em simultâneo com o projecto do material mais eficiente em cada ponto desse domínio recorrendo também a técnicas de homogeneização inversa. Aqui os modelos de material utilizados assentam tipicamente na classe de materiais de microestrutura periódica podendo diferir entre si de três maneiras quanto à descrição da microestrutura: (1) laminados

tipo *Rank-N*, (2) microestruturas com topologia fixa e (3) microestruturas sem topologia fixa. Os laminados tipo *Rank-N* (i.e., microestruturas formadas pela sobreposição de N escalas de comprimento, cada escala contendo um laminado orientado) têm tido muito interesse por permitirem soluções de rigidez extrema ou limite. Por exemplo, em problemas de *compliance* de estruturas contínuas bidimensionais sujeitas a um caso de carga, limites teóricos (*bounds*) de rigidez são obtidos com laminados tipo *Rank-2*, i.e., com lâminas dispostas de forma ortogonal entre as duas escalas (Jog *et al.* 1994; Diaz e Lipton 1997, 2000; Jacobsen *et al.* 1998; Rodrigues *et al.* 1999a; Olhoff *et al.* 1998). Do ponto de vista teórico este tipo de modelo de microestrutura é vantajoso pois permite ainda obter expressões analíticas para as propriedades equivalentes (homogeneizadas) e também permite prova formal da existência de soluções. Contudo, do ponto de vista prático, estas microestruturas não são fabricáveis (modelo de material fictício). As microestruturas de topologia fixa apresentam tipicamente uma parametrização associada às dimensões de uma perfuração (furo quadrado, circular, etc) e orientação espacial (Bendsøe e Kikuchi 1988; Suzuki e Kikuchi 1991; Fernandes *et al.* 1999a). As microestruturas de topologia livre são o resultado da solução de um problema de distribuição de material local, i.e., no domínio da célula base (Rodrigues *et al.* 2002).

O conceito de modelação multiescala tem sido um tópico de interesse nos últimos anos para a *análise* de estruturas e materiais caracterizados por diferentes comprimentos de escala. Dependendo do modo como a informação é transferida entre as diversas escalas de comprimento assim os métodos para a análise multiescala podem ser classificados em dois grandes grupos. O primeiro grupo envolve modelos hierárquicos onde a informação (tipicamente propriedades do material) entre escalas é passada das menores para as maiores escalas de comprimento através de homogeneização (*bottom-up transfer*). Os métodos do segundo grupo, designados por concorrentes, implementam o conceito de subestrutura (*substructuring*) e de modo concorrente consideram diferentes modelos (com diferentes resoluções ou escalas) em regiões diferentes. No caso destes últimos métodos dois modos de acoplamento de escalas são permitidos o que torna vantajosa a sua aplicação por exemplo, em problemas envolvendo dano ou fractura. Por um lado, é utilizada homogeneização (*bottom-up transfer*) em regiões (subestruturas) do domínio aproximadamente homogêneas em termos de deformação. Por outro lado, o processo de localização (*top-down transfer*) é utilizado em regiões (subestruturas) críticas do ponto de vista de dano, fractura ou instabilidade localizadas (efeitos locais). Aqui a microestrutura é modelada ao detalhe com uma discretização de dimensão característica muito menor que a dimensão característica das interfaces da

subestrutura em causa. Neste caso, é através destas interfaces que se faz a separação de escalas e por onde se processa a passagem de informação entre escalas. As referências listadas em seguida dizem respeito a trabalhos de análise linear/não-linear multiescala de estruturas aplicando as diferentes técnicas enunciadas, porém, sublinha-se que a técnica utilizada na análise multiescala realizada no âmbito desta dissertação é a homogeneização (Ghosh *et al.* 1995, 2001; Zhohdi *et al.* 1996; Smit *et al.* 1998; Fish e Shek 2000; Feyel e Chaboche 2000; Terada *et al.* 2000; Terada e Kikuchi 2001; Ladevèze *et al.* 2001; Kouznetsova *et al.* 2002; Ladevèze e Nouy 2003; Ibrahimbegovic e Markovic 2003; Raghavan e Ghosh 2004; Matsui *et al.* 2004; Miehe e Bayreuther 2007; Guidault *et al.* 2007; Valiveti e Ghosh 2007; Ganapathysubramanian e Zabaras 2008).

Trabalhos em *síntese* ou optimização multiescala de estruturas, ou seja, optimização da estrutura e do material, são comparativamente mais escassos (Fujii *et al.* 2001; Rodrigues *et al.* 2002; Zhang e Sun 2006; Yan *et al.* 2008; Coelho *et al.* 2008a). Em boa parte isto deve-se ao facto do elevado custo computacional associado a uma sequência de análises a duas escalas. Cada análise na escala macro implica a assemblagem de uma série de análises na escala micro. Visto que os problemas na escala micro são mutuamente independentes podem ser aplicadas técnicas de processamento paralelo para resolvê-los em simultâneo, o que se traduz numa redução substancial de tempo de cálculo (*wall-clock time*). Na parte restante desta introdução, faz-se uma descrição breve do conteúdo de cada um destes últimos trabalhos referenciados visto que estes mais de perto se relacionam com o tema desenvolvido nesta dissertação.

O trabalho de Fujii *et al.* (2001) apresenta uma tentativa de optimização concorrente de estrutura e material (bidimensional). O elevado custo computacional associado a este tipo de problemas explica a simplificação adoptada neste trabalho de considerar a densidade uniforme no domínio da estrutura, ou seja, a densidade dada pelo material celular periódico. Em Rodrigues *et al.* (2002) considera-se a formulação do problema de optimização concorrente multiescala com a derivação das respectivas condições de optimalidade. Exemplos bidimensionais são apresentados com discretizações de vários elementos finitos no domínio da estrutura. Em cada um destes elementos uma microestrutura caracterizando o material é optimizada de forma concorrente com a distribuição macroscópica de material. Sugere-se aqui que a solução dos problemas locais de optimização das microestruturas pode ser acelerada recorrendo a técnicas de processamento paralelo. Zhang e Sun (2006) não consideram o

problema de optimização da estrutura e material de forma concorrente. Primeiro, uma distribuição de material macroscópica de densidade variável é obtida através do modelo SIMP (sem penalização, i.e., $p = 1$). Depois, em cada região definida por densidade constante, assume-se a existência de um material celular e procede-se à optimização de topologia da respectiva microestrutura. Esta abordagem não garante uma solução combinada de “melhor” estrutura com “melhor” material. Yan *et al.* (2008) resolve o problema concorrente mas para um caso particular de material do tipo reticulado (treliça). Em Coelho *et al.* (2008a) está publicada uma primeira parte do trabalho desenvolvido no âmbito desta dissertação onde se estende o modelo de Rodrigues *et al.* (2002) ao espaço tridimensional e se implementam técnicas de processamento paralelo que, em alguns aspectos, tem analogia com as abordagens consideradas por Ladevèze *et al.* (2001) e Matsui *et al.* (2004).

1.2. Objectivos, motivação e aplicações da dissertação

A presente dissertação de doutoramento tem como principal **objectivo** dar um contributo de valor na investigação científica relacionada com a síntese/optimização concorrente da estrutura e do material (material celular de microestrutura periódica) e aplicar esta ferramenta para o aprofundar do conhecimento ao nível dos materiais naturais hierárquicos. Por detrás de todo o esforço envolvido existe uma forte **motivação** em modelar estruturas biológicas como é o caso do osso humano e simular o processo natural de adaptação/remodelação óssea. Por este motivo, a principal **aplicação** desta dissertação é o osso humano.

O contributo teórico/prático deste trabalho ao nível das estruturas mecânicas envolve a formulação do problema multiescala e projecto tridimensional da microestrutura que caracteriza o material da estrutura levando em conta possíveis restrições de manufactura e/ou de funcionalidade. Vários algoritmos de solução do problema hierárquico são apresentados e comparados entre si. Os algoritmos são desenvolvidos para serem executados em ambiente paralelo visto que o custo computacional da optimização hierárquica é muito elevado.

Ao nível das estruturas biológicas o contributo, por um lado, é a nível teórico através de toda uma formulação matemática que serve de base a um modelo ou lei de remodelação óssea. Por outro lado, existe um contributo a nível prático quer na vertente de diagnóstico clínico em observar como o osso se adapta, mesmo ao nível da microestrutura, a diferentes ambientes mecânicos envolventes, quer na vertente terapêutica através da assistência ao

projecto de *scaffolds* (suportes biomiméticos) com propriedades melhoradas para regeneração do tecido ósseo.

Os “grandes” objectivos desta dissertação, que acabaram de ser enunciados, são atingidos mediante a concretização de objectivos mais específicos enunciados em seguida:

- (1) Estender ao espaço tridimensional um modelo hierárquico para a análise e síntese de estruturas e materiais com critério único de máxima rigidez.
- (2) Formular o problema hierárquico incluindo restrições de projecto das microestruturas e desenvolvimento de estratégias algorítmicas de resolução deste problema constrangido.
- (3) Desenvolver um modelo hierárquico de remodelação óssea com introdução de factores biológicos que influenciam a arquitectura trabecular.
- (4) Desenvolver e implementar técnicas de processamento paralelo conducentes à obtenção de resultados numéricos em tempo útil.
- (5) Comparar os resultados do modelo numérico de remodelação óssea com resultados clínicos como tentativa preliminar de validar o modelo proposto.

1.3. Estrutura da dissertação

A dissertação está organizada em 7 capítulos, sendo o primeiro a “introdução” e o último “conclusões e desenvolvimentos futuros”. O corpo da dissertação está organizado de modo a reflectir as aplicações do modelo desenvolvido a dois domínios, por um lado, estruturas mecânicas (capítulos 2, 4) e, por outro lado, estruturas biológicas ou osso (capítulos 5, 6). Ao organizar a dissertação em redor das duas aplicações mencionadas, privilegiou-se a clareza da exposição dos assuntos por separar os desenvolvimentos analíticos (capítulos 2 e 5) e resultados (capítulos 4 e 6) respeitantes a estruturas mecânicas e biológicas. De facto, estas duas aplicações em causa sugerem abordagens e considerações que não se sobrepõem inteiramente.

O capítulo 1 introduz o tema da dissertação e apresenta um estado da arte sobre análise e síntese de estruturas e materiais, mais direccionado para as aplicações a estruturas mecânicas. O estado da arte dos modelos de remodelação óssea é apresentado no capítulo 5.

O capítulo 2 é um capítulo de fundamentos teóricos apresentados na perspectiva de optimização das estruturas mecânicas. No entanto, muitos destes fundamentos (por exemplo, homogeneização, formulação do problema de optimização, dedução das condições de optimalidade, etc) são também utilizados nas aplicações a estruturas biológicas dispensando-se a sua repetição no capítulo 5.

O capítulo 3 dedicado ao modelo numérico e algoritmos é, por assim dizer, um capítulo neutro quanto à especificidade da aplicação. Detalhes do modelo numérico de elementos finitos são apresentados. São também apresentadas diversas estratégias algorítmicas para resolver o problema de optimização hierárquica discutindo-se as vantagens e desvantagens de cada uma. É dada particular ênfase à versão em paralelo dos algoritmos e faz-se a descrição dos *clusters* de computação paralela utilizados para gerar os resultados apresentados nesta dissertação.

O capítulo 4 mostra resultados obtidos com estruturas mecânicas. Estes resultados permitem tirar conclusões úteis para os capítulos seguintes dedicados ao problema da remodelação óssea. Nomeadamente, é destacada a importância da introdução de constrangimentos de projecto ao nível da microescala.

O capítulo 5 introduz o tema da remodelação óssea. Apresenta-se o estado da arte das leis de remodelação óssea. Formula-se o problema de remodelação óssea proposto nesta dissertação salientando-se a relevância de factores/constrangimentos biológicos ao nível da modelação do osso na microescala.

O capítulo 6 é um segundo capítulo de resultados inteiramente dedicado à aplicação do modelo hierárquico a estruturas biológicas, neste caso o osso fémur humano. Comparativamente ao capítulo 4 de resultados, o problema do osso envolve um tratamento dos resultados mais refinado dado o significado biológico de alguns parâmetros como a anisotropia, porosidade, densidade de superfície ou permeabilidade. É apresentado um estudo de variação de massa óssea desde o estado considerado saudável ao de doença (osteoporose). Procura-se uma validação do modelo por confrontação dos resultados numéricos com os resultados obtidos através de exames de densitometria óssea.

O capítulo 7 faz um resumo do trabalho apresentado, tira conclusões dos principais resultados apresentados e aponta novos caminhos de investigação para o futuro.

Capítulo 2

Optimização Hierárquica de Estruturas

2.1. Modelo material

A optimização hierárquica de estruturas apresentada nesta dissertação baseia-se num modelo tridimensional de material hierárquico com separação de duas escalas de comprimento, escalas macro e microscópica identificadas com o domínio ocupado pela estrutura e material, respectivamente. O material é assumido como compósito (celular) de microestrutura periódica. O método de homogeneização é utilizado para passagem de informação da micro para a macroescala de modo a tratar um meio heterogéneo como um meio homogéneo equivalente, i.e., com propriedades mecânicas equivalentes ou homogeneizadas.

A escala macroscópica é caracterizada pelo campo escalar $\rho(\mathbf{x})$ (densidade macroscópica) que varia com o vector posição \mathbf{x} no domínio Ω ocupado pela estrutura assumida como o corpo linear elástico. O objectivo é encontrar o *lay-out* óptimo da estrutura para determinadas condições de carga e de deslocamento imposto. A escala microscópica é caracterizada pelo campo escalar $\mu(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ (densidade microscópica) que varia com o vector posição \mathbf{y} no domínio Y para um \mathbf{x} fixo em Ω . O domínio Y é o domínio de projecto do material da estrutura (assume-se domínio unitário, i.e., $|Y| = 1$) e representa o espaço ocupado por uma célula de base que é a microestrutura mais pequena que se repete de forma periódica para gerar o material compósito celular.

As condições aplicadas na fronteira $\partial\Omega$ da estrutura são forças de superfície \mathbf{t} em Γ_t e deslocamentos impostos \mathbf{u} em Γ_u (ver figura 2.1). Adicionalmente, a estrutura pode estar

sujeita a forças volúmicas \mathbf{b} (por exemplo, gravidade). Ambos os campos escalares, $\rho(\mathbf{x})$ e $\mu(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, variam entre 0 (branco) e 1 (preto) o que significa ausência ou presença de material, respectivamente. Um valor intermédio (cinzento) da densidade aparente ρ em cada ponto $\mathbf{x} \in \Omega$ corresponde a uma fracção volúmica de material que se assume distribuído numa pequena vizinhança desse ponto \mathbf{x} de forma periódica, i.e., gerado pela repetição de uma célula de base. Portanto, cada ponto “cinzento” da estrutura tem significado físico, i.e., corresponde à existência de um material celular. Além do mais, a periodicidade referida é apenas local pois a topologia da célula de base pode variar com a variável macroscópica \mathbf{x} assumindo, porém, transições suaves. Assume-se ainda que a dimensão característica d desta célula de base é muito menor que a dimensão característica D do corpo em Ω ($d \ll D$). Esta hipótese está associada à separação de escalas considerada pela teoria de homogeneização assintótica para calcular as propriedades macroscópicas homogeneizadas equivalentes às do meio heterogéneo caracterizado por uma microestrutura periódica (secção 2.2).

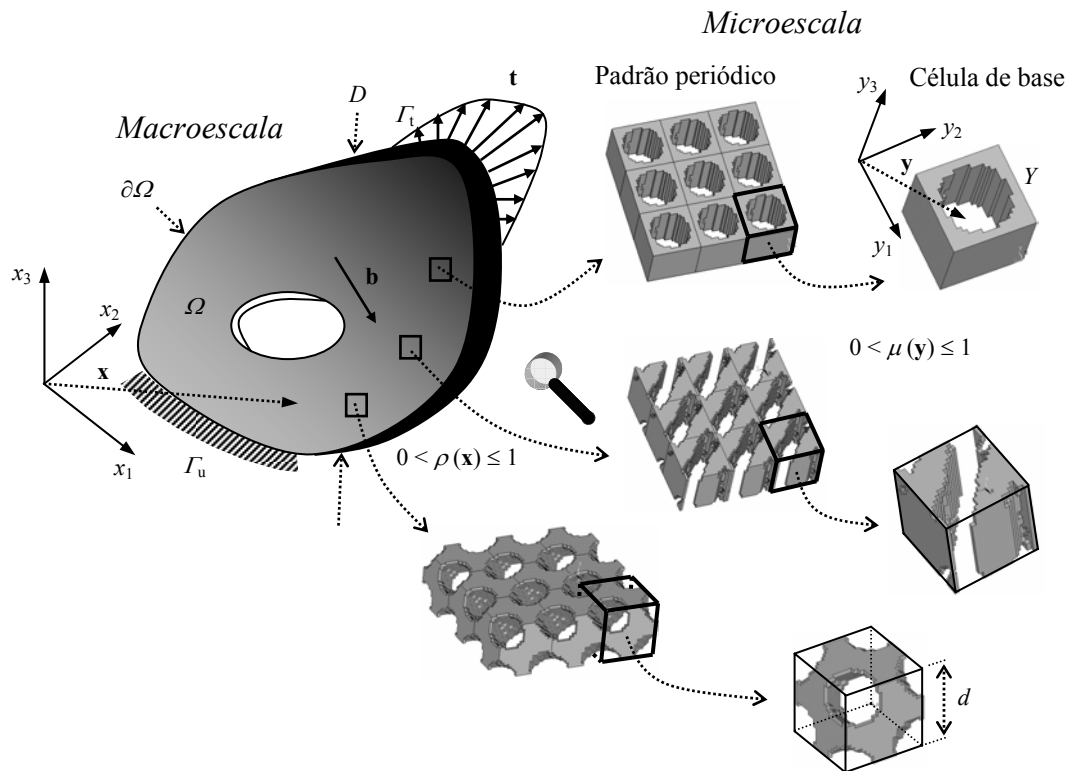


Figura 2.1. Modelo material hierárquico de duas escalas.

A topologia de cada microestrutura (célula) de base constitui a solução de um problema anisotrópico de distribuição de material no domínio Y (problema local) governado pela variável de densidade μ . Apesar de μ ser uma variável contínua, valores intermédios (cinzentos) desta densidade não têm significado físico e são penalizados através do método

SIMP (*Solid Isotropic Material with Penalization*) pois neste caso apenas se pretende que a topologia final da célula fique determinada pela ausência/presença (0/1) de material de base. Este material de base é, portanto, considerado linear isotrópico e, deste modo, para $\rho = 1$ fica definido um sólido linear isotrópico como material da estrutura.

Resumindo, o modelo material apresentado permite resolver um problema de distribuição de material a duas escalas governado pelos campos escalares de densidade, $\rho(\mathbf{x})$ e $\mu(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, identificados respectivamente com as escalas da estrutura e do material de que esta é construída. Os esquemas de interpolação entre propriedades elásticas e densidade utilizados às escalas macro e microscópica são os métodos de homogeneização e SIMP, respectivamente. A formulação matemática do problema de optimização hierárquica será apresentada na secção 2.3. Antes, porém, será apresentada com mais detalhe na secção 2.2 a técnica de homogeneização utilizada neste trabalho para o cálculo das propriedades do material celular periódico.

2.2. Homogeneização

Considere-se, por exemplo, o problema da elasticidade caracterizado por um meio $\varepsilon\mathcal{H}^n$ heterogéneo que pode ser um material compósito ou poroso. Pretende-se investigar o comportamento mecânico (por exemplo, deslocamentos \mathbf{u}^ε , constantes elásticas \mathbf{E}^ε) de um volume ou domínio \mathcal{Q}^ε deste meio sujeito a determinada solitação através de condições de fronteira \mathbf{t} ou forças volúmicas \mathbf{b} . Este é um problema clássico de valor de fronteira em Física/Matemática. Quando o número de heterogeneidades é pequeno (ou não muito grande) a solução pode ser deduzida usando métodos analíticos (directos) ou numéricos. Quando aquele número se torna muito grande estes métodos tornam-se impraticáveis. O compósito ilustrado na figura 2.2 é gerado pela repetição periódica de um elemento representativo da heterogeneidade que é uma célula quadrada com furo circular. Se a microestrutura periódica apresentar um elevado número de furos, torna-se impraticável uma modelação numérica do seu detalhe pois, no caso de ser utilizado o MEF conforme se ilustra, a discretização utilizada teria que ser pelo menos tão fina quanto a dimensão dos furos. Uma modelação computacional assim resultaria em milhões de graus de liberdade tornando proibitivos tanto o espaço em memória como o tempo de CPU requerido para obter uma solução numérica.

Uma ideia clássica é substituir o meio heterogêneo por um contínuo homogêneo equivalente que traduz o comportamento em média (homogeneizado) do meio original incorporando os efeitos da microescala e estando sujeito às mesmas condições de fronteira à escala macroscópica, i.e., à escala do domínio contendo um grande número de heterogeneidades. Uma forma de se obter tal descrição macroscópica equivalente consiste em passar em termos médios a descrição do comportamento à escala da heterogeneidade (problema na escala local ou microescala onde as equações de equilíbrio e leis constitutivas são conhecidas) para a escala macroscópica ou global. Este processo de transferência de informação micro-macro (*bottom-up transfer*) é designado de homogeneização e foi sobretudo desenvolvido durante a década de 1970. A técnica da homogeneização aplicada a meios periódicos com base em expansões assintóticas a duas escalas surge nos trabalhos de Babuska (1976), Bensoussan *et al.* (1978), Sanchez-Palencia (1980), Lions (1981), Kalamkarov e Kolpakov (1997). Implementações computacionais da teoria da homogeneização para compósitos de microestrutura periódica através do método dos elementos finitos podem ser vistas em Guedes e Kikuchi (1990) e Michel *et al.* (1999).

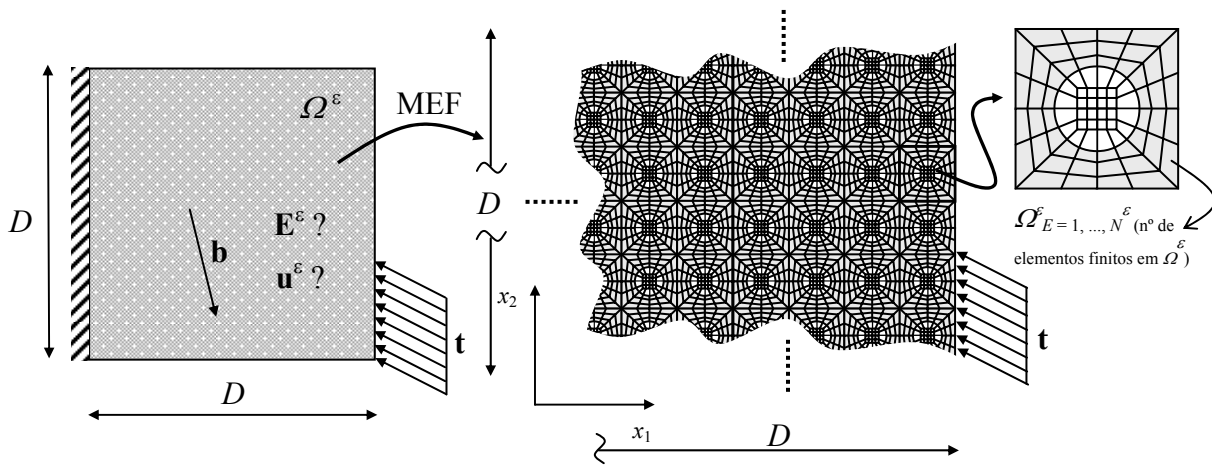


Figura 2.2. Domínio heterogêneo e modelo de elementos finitos da microestrutura.

Acrescente-se, porém, que a homogeneização pode envolver ainda a aplicação de outras técnicas matemáticas (veja-se as revisões de Mura 1987; Nemat-Nasser e Hori 1993), tais como: aproximações variacionais usando princípios de extremo (Hashin e Shtrikman 1963; Nemat-Nasser *et al.* 1993), aproximações probabilísticas (Chen e Acrivos 1978), método auto-consistente (Hill 1965; Budiansky 1965; Zaoui 1987), método auto-consistente generalizado (Christensen e Lo 1979; Hori e Nemat-Nasser 1993), método estatístico (Kröner

1986), métodos de médias volumétricas (Voigt 1889; Reuss 1929), método generalizado das células (Paley e Aboudi 1992).

O trabalho da presente dissertação aplica a teoria da homogeneização para meios periódicos baseada em expansões assintóticas a duas escalas. O processo de homogeneização permite a “eliminação” da escala micro em favor da macroscópica, mas à custa de se tolerar uma perda de precisão de resultados comparada com a precisão do modelo detalhado de toda a microestrutura. Neste contexto, torna-se importante avaliar até que ponto o problema real se aproxima das hipóteses assumidas pela teoria da homogeneização. Estas hipóteses são basicamente as três mencionadas de seguida.

A homogeneização para meios periódicos assume periodicidade na distribuição da heterogeneidade pelo domínio macroscópico. Qualquer propriedade ψ física ou geométrica é periódica se for satisfeito:

$$\mathbf{x} \in \Omega \text{ e } (\mathbf{x} + \mathbf{y}) \in \Omega \Rightarrow \psi(\mathbf{x} + \mathbf{y}) = \psi(\mathbf{x}) \quad (2.1)$$

A condição de periodicidade não obriga a que a microestrutura seja sempre a mesma em todo o domínio macroscópico. Transições suaves de topologia na microestrutura são permitidas desde que se mantenha uma condição de periodicidade local, i.e., numa pequena vizinhança de cada ponto da macroescala. Esta hipótese restringe as aplicações a materiais periódicos ou que possam ser considerados quase periódicos.

Outra hipótese da teoria da homogeneização é a de uniformidade dos campos macroscópicos (por ex., tensão ou deformação) atribuída a cada célula representativa da microestrutura do domínio macroscópico. Esta hipótese implica que a homogeneização não seja apropriada quando aplicada a regiões críticas do domínio caracterizadas por gradientes elevados, i.e., onde os campos macroscópicos na realidade variam consideravelmente (por exemplo, zonas de fractura com conseqüente concentração de tensões).

Outra hipótese assumida pela teoria da homogeneização é a de separação de escalas, i.e., existe um volume elementar representativo da heterogeneidade (célula unitária no caso do meio periódico) com dimensão característica d muito menor do que a dimensão característica

D do domínio macroscópico. O quociente entre estas dimensões características define um parâmetro adimensional denominado coeficiente homotético¹:

$$\varepsilon = \frac{d}{D} \quad (2.2)$$

A separação de escalas nas entidades físicas e geométricas utilizada pela teoria de homogeneização implica então que $\varepsilon \ll 1$. Na realidade, conforme se verá à frente, as propriedades homogeneizadas são calculadas para a situação limite de $\varepsilon \rightarrow 0$. Este limite pode ser interpretado como célula de base infinitesimal, número infinito de heterogeneidades ou padrão periódico infinito. Portanto, a teoria da homogeneização resolve um problema sem dimensões (adimensional) quando, em termos práticos, os materiais compósitos apresentam heterogeneidades e domínio macroscópico com dimensões finitas ($0 < \varepsilon < 1$). Os problemas de escala em homogeneização de materiais compósitos celulares têm sido considerados por Zhang e Sun (2006), Sutherland *et al.* (1999), Burgueño *et al.* (2005), Tantikom *et al.* (2005) e Pecullan *et al.* (1999), Bendsøe e Triantafyllidis (1990).

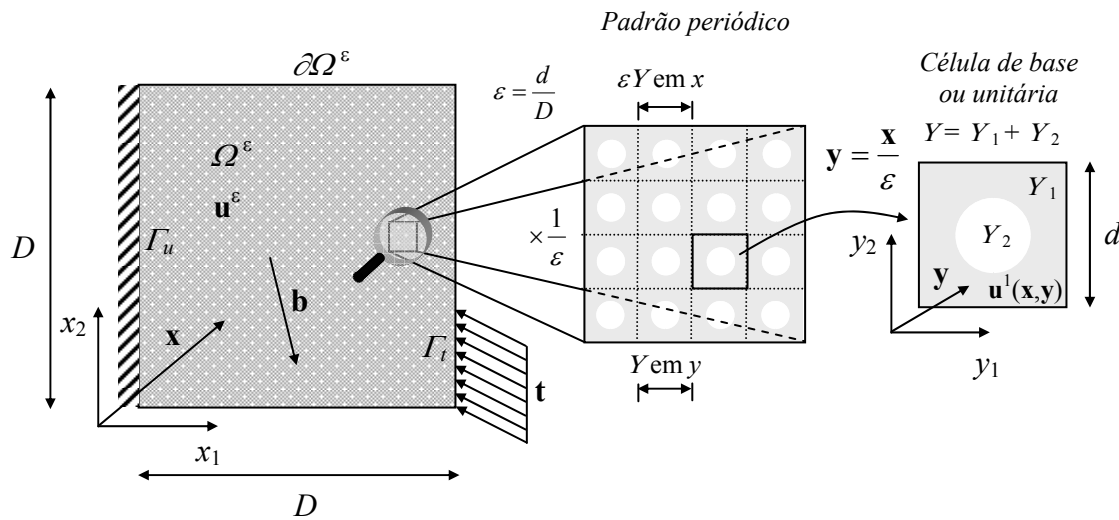


Figura 2.3. Modelo material de microestrutura periódica.

A figura 2.3 resume o modelo material utilizado pela teoria de homogeneização para meios periódicos. Em termos ilustrativos, considera-se aqui uma caracterização do problema da elasticidade onde um corpo elástico de microestrutura periódica ocupa o domínio Ω^ε (o índice ε denota uma associação com duas escalas de comprimento) com fronteira

¹ Esta denominação resulta deste parâmetro poder ser visto como um factor de ampliação que aumenta as dimensões da célula de base para ser comparável com as dimensões da escala macroscópica (ver Hassani and Hinton 1998; Devries *et al.* 1989).

Lipschitziana¹ $\partial\Omega^\varepsilon = \Gamma_u \cup \Gamma_t$, $\Gamma_u \cap \Gamma_t = \emptyset$ (conjuntos disjuntos não vazios). As fronteiras Γ_u e Γ_t correspondem às fronteiras de deslocamento \mathbf{u} e tensão \mathbf{t} impostos, respectivamente. O corpo poderá também estar sujeito a forças volúmicas \mathbf{b} . A dimensão D é a dimensão característica do domínio macroscópico Ω^ε . A variável de posição espacial \mathbf{x} caracteriza a escala de comprimento macroscópica. O domínio macroscópico quando ampliado por um factor $1/\varepsilon$ torna observável uma microestrutura periódica definida por uma célula unitária Y ($[0,1]^n$). Y_1 e Y_2 representam a parte sólida e furo de Y , respectivamente. Ao domínio da célula está associada uma escala de comprimento microscópica caracterizada pela variável de posição espacial \mathbf{y} . Conforme já referido, a dimensão d desta célula é muito menor do que D , i.e., $\varepsilon \ll 1$. O período de repetição é εY e Y nos referenciais macro e microscópico, respectivamente. A relação entre as variáveis espaciais macro e microscópica é $\mathbf{y} = \mathbf{x}/\varepsilon$.

Quando o corpo é sujeito a uma solicitação exterior (carga ou deslocamento), a resposta da estrutura, por exemplo, o deslocamento \mathbf{u}^ε varia, por um lado, na escala macroscópica de ponto para ponto com a variável \mathbf{x} (variação considerada lenta ou suave). Por outro lado, o elevado nível de heterogeneidades na microestrutura do corpo causa uma variação ou oscilação rápida de \mathbf{u}^ε numa pequena vizinhança ε do ponto \mathbf{x} , ou seja, essa variação é rápida na escala microscópica com a variável espacial \mathbf{y} . Todos os campos macroscópicos de deslocamento, deformação, tensão ou propriedades elásticas dependem de ambos os comprimentos de escala e variam de forma periódica com período εY ou Y consoante se considere a escala de observação macro ou micro. Por exemplo, para o deslocamento assume-se $\mathbf{u}^\varepsilon(\mathbf{x}) = \mathbf{u}\left(\mathbf{x}, \frac{\mathbf{x}}{\varepsilon}\right)$, onde $\mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ é Y -periódica em \mathbf{y} para cada $\mathbf{x} \in \Omega$. Na teoria da homogeneização assintótica, assume-se que a resposta da estrutura é aproximada por uma expansão assintótica em potências de ε relativamente à coordenada global \mathbf{x} . Por exemplo, considerando essa expansão para o campo de deslocamento tem-se:

$$\mathbf{u}^\varepsilon(\mathbf{x}) = \mathbf{u}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon \mathbf{u}^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon^2 \mathbf{u}^2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^i \mathbf{u}^i(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad \mathbf{y} = \frac{\mathbf{x}}{\varepsilon} \quad (2.3)$$

A homogeneização do meio heterogéneo considera-se perfeita quando $\varepsilon \rightarrow 0$. Visto que na prática ε toma um valor pequeno, mas finito, a descrição macroscópica equivalente dada por \mathbf{u}^0 (conforme se provará na secção seguinte) representa uma aproximação do comportamento

¹ Fronteira contínua de variação suave.

real do meio heterogéneo. Em aproximações de primeira ordem, *i.e.*, até ao termo em ε , o campo de deslocamento no domínio da célula é dado por \mathbf{u}^1 e é responsável pelo carácter oscilatório da solução \mathbf{u}^ε devido à condição de periodicidade na microestrutura (solução Y -periódica).

Expansões assintóticas dos deslocamentos e tensões concretizadas na formulação variacional do problema da elasticidade permitem não só obter propriedades do material compósito equivalentes ou homogeneizadas (secção 2.2.1), mas também as distribuições de tensão e deslocamento em cada uma das escalas, macro e microscópica. De forma análoga, pode-se aplicar homogeneização a problemas de escoamento potencial, como por exemplo, condução de calor ou escoamento de um fluido através de um meio poroso de microestrutura periódica (secção 2.2.2). Em seguida, faz-se a descrição da homogeneização dos problemas da elasticidade e de escoamento potencial divulgando os passos principais da teoria e os resultados na medida das necessidades para a compreensão das secções posteriores desta dissertação.

2.2.1. Problema de elasticidade

Considerem-se válidas as hipóteses da mecânica dos meios contínuos e um domínio heterogéneo limitado e regular Ω^ε caracterizado pelo parâmetro ε . O problema da elasticidade estacionário é formulado como um problema de valor de fronteira que consiste na determinação do campo de deslocamentos \mathbf{u}^ε de modo a satisfazer a equação diferencial elíptica que traduz fisicamente a condição de equilíbrio de tensões $\boldsymbol{\sigma}$ (incluindo forças volúmicas \mathbf{b}) sujeita às condições fronteira de tracção \mathbf{t} em Γ_t (condição de Neumann) e deslocamento \mathbf{u} imposto em Γ_u (condição de Dirichlet):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma_{ij}^\varepsilon}{\partial x_i} + b_j &= 0 \quad \text{em } \Omega^\varepsilon \\ \sigma_{ij}^\varepsilon n_i &= t_j \quad \text{em } \Gamma_t \\ u^\varepsilon &= 0 \quad \text{em } \Gamma_u \end{aligned} \tag{2.4}$$

Nesta secção 2 da dissertação utiliza-se notação indicial para os tensores e vectores e, nas operações tensoriais, considera-se a convenção de Einstein¹.

¹ Convenção dos índices repetidos ou convenção soma.

O vector \mathbf{n} representa a normal unitária exterior onde está aplicada a tracção exterior \mathbf{t} . A lei constitutiva considerada é a lei de Hooke para elasticidade linear:

$$\sigma_{ij}^\varepsilon = E_{ijkl}^\varepsilon e_{kl}^\varepsilon \quad (2.5)$$

com o tensor das deformações linearizado¹:

$$e_{km}^\varepsilon(\mathbf{u}^\varepsilon) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_k^\varepsilon}{\partial x_m} + \frac{\partial u_m^\varepsilon}{\partial x_k} \right) \quad (2.6)$$

O tensor de quarta ordem caracterizando as propriedades elásticas do material assim como os tensores de segunda ordem das tensões e deformações satisfazem as seguintes propriedades de simetria:

$$E_{ijkl}^\varepsilon = E_{jikl}^\varepsilon = E_{ijlk}^\varepsilon = E_{klij}^\varepsilon ; \sigma_{ij}^\varepsilon = \sigma_{ji}^\varepsilon ; e_{ij}^\varepsilon = e_{ji}^\varepsilon \quad (2.7)$$

Estas simetrias implicam que o tensor da elasticidade \mathbf{E} , definido no espaço tridimensional por 81 constantes elásticas, apresenta apenas 21 constantes independentes.

Assumindo que a densidade de energia de deformação é sempre positiva para campos de deformação admissíveis², o tensor \mathbf{E}^ε é positivo definido:

$$\exists \beta_{>0} : E_{ijkl}^\varepsilon e_{ij} e_{kl} = \beta e_{ij} e_{ij}, \forall e_{ij} = e_{ji} \quad (2.8)$$

Procedendo a substituições, o problema (2.4) pode ser reescrito na forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(E_{ijkl}^\varepsilon \frac{\partial u_k^\varepsilon}{\partial x_m} \right) + b_j &= 0 \quad \text{em } \Omega^\varepsilon \\ E_{ijkl}^\varepsilon \frac{\partial u_k^\varepsilon}{\partial x_m} n_i &= t_j \quad \text{em } \Gamma_t \\ u^\varepsilon &= 0 \quad \text{em } \Gamma_u \end{aligned} \quad (2.9)$$

De acordo com (2.9), o problema da elasticidade para um meio heterogéneo de microestrutura periódica caracteriza-se por equações diferenciais com coeficientes:

$$E_{ijkl}^\varepsilon(\mathbf{x}) = E_{ijkl}(\mathbf{x}, \mathbf{x}/\varepsilon) = E_{ijkl}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad (2.10)$$

exibindo um comportamento tanto mais oscilatório quanto menor o valor de ε , ou seja, quanto maior o número de períodos Y em \mathbf{y} ou εY em \mathbf{x} . No caso de ε ser muito pequeno, uma

¹ Tensor das deformações infinitesimais ou das deformações de Cauchy. Considera-se, portanto, válida a hipótese de pequenas deformações e de pequenos deslocamentos.

² Condição de Elipticidade.

solução analítica ou numérica de (2.9) é impossível de se obter, pelo que, o problema de valor de fronteira pode ser tratado expandindo assimptoticamente a sua solução em potências do pequeno parâmetro ε tal como apresentado em (2.3). Aplicando esta técnica, a homogeneização do problema (2.9) é obtida para a situação limite $\varepsilon \rightarrow 0$. No limite obtém-se um problema equivalente a (2.9) com coeficiente $\mathbf{E}^0(\mathbf{x}) = \mathbf{E}^H(\mathbf{x})$ e deslocamento $u^0(\mathbf{x})$ apenas dependentes da escala macroscópica pois caracterizam agora um meio homogéneo equivalente ao meio original heterogéneo. A caracterização de $\mathbf{E}^H(\mathbf{x})$ pela teoria da homogeneização é o principal resultado dos desenvolvimentos apresentados nesta secção. Para o efeito, a expansão (2.3) poder-se-ia substituir directamente na equação diferencial (2.9). No entanto, pretende-se antes considerar o problema (2.9) formulado em termos do princípio dos trabalhos virtuais¹ (2.11), com deslocamento virtual ou função de teste \mathbf{v} , que serve de base a uma solução numérica utilizando o método dos elementos finitos, que é o método escolhido neste trabalho (capítulo 3).

$$\int_{\Omega^\varepsilon} E_{ijkl}^\varepsilon \frac{\partial u_k^\varepsilon}{\partial x_m} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} d\Omega = \int_{\Omega^\varepsilon} b_i^\varepsilon v_i d\Omega + \int_{\Gamma_i} t_i v_i d\Gamma, \quad \forall \mathbf{v} \in V_{\Omega^\varepsilon} \quad (2.11)$$

$$V_{\Omega^\varepsilon} = \left\{ \mathbf{v} \text{ definida em } \Omega^\varepsilon, \text{ suficientemente regular : } \mathbf{v}|_{\Gamma_u} = 0 \right\}$$

O objectivo do processo de homogeneização que se segue é encontrar um problema de equilíbrio equivalente a (2.11) que possa ser descrito apenas através de grandezas macroscópicas.

Em primeiro lugar, note-se que a derivada espacial em relação a \mathbf{x} de qualquer função ψ dependendo de duas escalas de comprimento é dada por:

$$\left. \frac{\partial}{\partial x_j} (\psi_i^l(\mathbf{x}, \mathbf{y})) \right|_{\mathbf{y}=\frac{\mathbf{x}}{\varepsilon}} = \left(\frac{\partial \psi_i^l}{\partial x_j} + \frac{\partial \psi_i^l}{\partial y_j} \frac{1}{\varepsilon} \right) \bigg|_{\mathbf{y}=\frac{\mathbf{x}}{\varepsilon}} \quad (2.12)$$

Introduzindo a expansão (2.3) até ao termo de ε^2 em (2.11) e levando em conta (2.12), obtém-se (2.13). No primeiro membro da equação (2.13) estão agrupados os termos da mesma potência de ε .

¹ Também designada formulação fraca ou variacional.

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega^\varepsilon} E_{ijk}^\varepsilon \left\{ \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\partial u_k^0}{\partial y_m} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} + \right. \\
& \quad + \frac{1}{\varepsilon^1} \left[\left(\frac{\partial u_k^0}{\partial x_m} + \frac{\partial u_k^1}{\partial y_m} \right) \frac{\partial v_i}{\partial y_j} + \frac{\partial u_k^0}{\partial y_m} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right] + \\
& \quad + \varepsilon^0 \left[\left(\frac{\partial u_k^0}{\partial x_m} + \frac{\partial u_k^1}{\partial y_m} \right) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \left(\frac{\partial u_k^1}{\partial x_m} + \frac{\partial u_k^2}{\partial y_m} \right) \frac{\partial v_i}{\partial y_j} \right] + \\
& \quad \left. + \varepsilon^1(\dots) + \dots \right\} d\Omega = \int_{\Omega^\varepsilon} b_i^\varepsilon v_i d\Omega + \int_{\Gamma} t_i v_i d\Gamma, \quad \forall \mathbf{v} \in V_{\Omega \times \mathbb{Y}} \\
& V_{\Omega \times \mathbb{Y}} = \left\{ \mathbf{v}(\mathbf{x}, \mathbf{y}); (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \Omega \times \mathbb{Y} \mid \mathbf{v}(\cdot, \mathbf{y}) \text{ Y-periódica}; \right. \\
& \quad \left. \text{suficientemente regular e } \mathbf{v}|_{\Gamma_u} = 0 \right\}
\end{aligned} \tag{2.13}$$

Nesta equação \mathbb{Y} representa a parte sólida (Y_1 na figura 2.3) do domínio da célula de base Y . Para uma função Y -periódica e suficientemente regular verifica-se o resultado dado por (2.14), vejam-se Sanchez-Palencia (1980) e Lions (1981).

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left(\int_{\Omega^\varepsilon} \Psi \left(\mathbf{x}, \frac{\mathbf{x}}{\varepsilon} \right) d\Omega \right) = \int_{\Omega} \frac{1}{|Y|} \left(\int_{\mathbb{Y}} \Psi(\mathbf{y}) dY \right) d\Omega \tag{2.14}$$

Este resultado legitima formalmente a existência da média volumétrica $\langle \Psi \rangle$ (2.15), na descrição do comportamento da célula unitária através de dada função Ψ , quando se passa ao limite $\varepsilon \rightarrow 0$:

$$\langle \Psi \rangle = \frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} \Psi(\mathbf{y}) dY \tag{2.15}$$

Igualando a zero os termos em (2.13) de mesma potência ε e aplicando o resultado de (2.14) assumindo que todas as funções são suaves e que todos os integrais existem quando $\varepsilon \rightarrow 0$, obtêm-se os problemas (2.16) a (2.18), um por cada potência de ε :

$$\text{termo } \frac{1}{\varepsilon^2}: \quad \int_{\Omega} \left(\frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} E_{ijk} \frac{\partial u_k^0}{\partial y_m} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY \right) d\Omega = 0, \forall \mathbf{v} \in V_{\Omega \times \mathbb{Y}} \tag{2.16}$$

$$\text{termo } \frac{1}{\varepsilon}: \quad \int_{\Omega} \left(\frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} E_{ijk} \left[\left(\frac{\partial u_k^0}{\partial x_m} + \frac{\partial u_k^1}{\partial y_m} \right) \frac{\partial v_i}{\partial y_j} + \frac{\partial u_k^0}{\partial y_m} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right] dY \right) d\Omega = 0, \forall \mathbf{v} \in V_{\Omega \times \mathbb{Y}} \tag{2.17}$$

$$\begin{aligned} \text{termo } \varepsilon^0 : \quad & \int_{\Omega} \left(\frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} E_{ijkl} \left\{ \left[\left(\frac{\partial u_k^0}{\partial x_m} + \frac{\partial u_k^1}{\partial y_m} \right) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \left(\frac{\partial u_k^1}{\partial y_m} + \frac{\partial u_k^2}{\partial y_m} \right) \frac{\partial v_i}{\partial y_j} \right] \right\} dY \right) d\Omega = \\ & = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} b_i v_i dY \right) d\Omega + \int_{\Gamma_t} t_i v_i d\Gamma, \forall \mathbf{v} \in V_{\Omega \times \mathbb{Y}} \end{aligned} \quad (2.18)$$

Repare-se que agora o tensor da elasticidade é local, i.e., varia com a variável \mathbf{y} no domínio Y . Este tensor caracteriza o material base de que é feita a microestrutura. Tipicamente, esse material é considerado um sólido linear isotrópico.

O problema (2.16), associado ao termo de potência ε^{-2} , resulta no seguinte problema local (no domínio da célula de base):

$$\begin{aligned} & \frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} E_{ijkl} \frac{\partial u_k^0}{\partial y_m} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY = 0, \quad \forall \mathbf{v} \in V_{\mathbb{Y}} \\ V_{\mathbb{Y}} = \{ & \mathbf{v}(\mathbf{y}) \text{ definida em } \mathbb{Y} | \mathbf{v}(\mathbf{y}) \text{ suficientemente regular, } Y\text{-periódica} \} \end{aligned} \quad (2.19)$$

A solução deste problema local existe e é independente da variável \mathbf{y} (veja-se Lions 1981, Lema 2.1, pp 10). Isto permite concluir que o primeiro termo da expansão assintótica (2.3) apenas depende da escala macroscópica \mathbf{x} :

$$\mathbf{u}^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{u}^0(\mathbf{x}) \quad (2.20)$$

Usando este resultado no problema (2.17), associado ao termo de potência ε^{-1} , obtém-se outro problema local dado por:

$$\int_{\mathbb{Y}} E_{ijkl} \frac{\partial u_k^1}{\partial y_m} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY = - \frac{\partial u_k^0(\mathbf{x})}{\partial x_m} \int_{\mathbb{Y}} E_{ijkl} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY, \quad \forall \mathbf{v} \in V_{\mathbb{Y}} \quad (2.21)$$

A solução \mathbf{u}^1 pode ser obtida por:

$$u_i^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = - \frac{\partial u_k^0(\mathbf{x})}{\partial x_m} \chi_i^{km}(\mathbf{y}) + \hat{u}_i^1(\mathbf{x}) \quad (2.22)$$

onde \hat{u}_i^1 são constantes de integração em \mathbf{y} e χ_i^{km} são solução do problema local modificado:

$$\int_{\mathbb{Y}} E_{ijrs} \frac{\partial \chi_r^{km}}{\partial y_s} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY = \int_{\mathbb{Y}} E_{ijkl} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY, \quad \forall \mathbf{v} \in V_{\mathbb{Y}} \quad (2.23)$$

Observando a equação (2.22), os valores de χ_i^{km} podem ser encarados como operadores de transferência de informação entre escalas (neste caso a transferência: deformação-macro \rightarrow deslocamento-micro). Além do mais, observe-se que a estrutura de (2.23) pode assumir a forma de um sistema de equações lineares numa formulação de elementos finitos ($\mathbf{Ku} = \mathbf{f}$) apropriada para se obter uma solução numérica das incógnitas χ_i^{km} considerando condições de periodicidade¹. O vector χ^{km} é uma função Y -periódica (χ_i^{km} toma valores iguais em lados opostos do domínio Y) e pode ser interpretado como um campo de deslocamento obtido para o caso de carga km . Em problemas tridimensionais isto significa que são resolvidos seis casos de carga para a obtenção dos vectores: χ^{11} , χ^{22} , χ^{33} , χ^{12} , χ^{13} , χ^{23} . Estas soluções podem ser interpretadas como modos característicos de deformação da célula de base em resposta a cargas distribuídas cujas intensidades dependem das propriedades elásticas do material E_{ijk} (ver segundo membro da equação 2.23). Outra forma de encarar o vector de cargas em (2.23) é reescrevê-lo como:

$$\int_{\mathbb{Y}} E_{ijrs} \frac{\partial \chi_r^{km}}{\partial y_s} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY = \int_{\mathbb{Y}} E_{ijrs} e_{rs}^{0(km)} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY, \quad \forall \mathbf{v} \in V_{\mathbb{Y}} \quad (2.24)$$

Aqui os vectores χ^{km} podem ser interpretados como deformações características da célula em resposta à aplicação de seis estados de deformação de teste unitários macroscópicos²: $e_{rs}^{0(11)} = (1,0,0,0,0,0)$, $e_{rs}^{0(22)} = (0,1,0,0,0,0)$, $e_{rs}^{0(33)} = (0,0,1,0,0,0)$, $e_{rs}^{0(12)} = (0,0,0,1,0,0)$, $e_{rs}^{0(13)} = (0,0,0,0,1,0)$, $e_{rs}^{0(23)} = (0,0,0,0,0,1)$. No entanto, sublinhe-se que o vector de cargas é caracterizado pela multiplicação de tensores $E_{ijrs} e_{rs}^{0(km)}$ e, portanto, por exemplo para $e_{rs}^{0(11)}$ o vector de cargas resultante não tem apenas a direcção 11, mas sim 11 e 22 com intensidades E_{1111} e E_{1122} , respectivamente.

Seja o campo arbitrário de deslocamento \mathbf{v} no problema (2.18), associado ao termo de potência ε^0 , escolhido de tal forma que só depende da variável macroscópica $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x})$. De (2.18) resulta então o seguinte problema:

¹ Note-se que este problema local, resolvido no domínio da célula, depende unicamente de características microscópicas. É independente das condições de fronteira impostas nas fronteiras exteriores macroscópicas do meio heterogéneo.

² Extensões em três direcções e três deformações de corte. Considere-se ainda a seguinte notação simplificada para o tensor das deformações (simétrico): $e_{ij} = (e_{11}, e_{22}, e_{33}, e_{12}, e_{13}, e_{23})$.

$$\int_{\Omega} \left(\left[\frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} E_{ijk} \left(\frac{\partial u_k^0}{\partial x_m} + \frac{\partial u_k^1}{\partial y_m} \right) dY \right] \frac{\partial v_i(\mathbf{x})}{\partial x_j} \right) d\Omega = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} b_i v_i dY \right) d\Omega + \int_{\Gamma_t} t_i v_i d\Gamma, \forall \mathbf{v} \in V_{\Omega} \quad (2.25)$$

$$V_{\Omega} = \left\{ \mathbf{v}(\mathbf{x}) \text{ definida em } \Omega \mid \mathbf{v} \text{ suficientemente regular e } \mathbf{v}|_{\Gamma_u} = 0 \right\}$$

Substituindo a solução de \mathbf{u}^1 dada por (2.22) na equação (2.25), o problema de equilíbrio global ou na escala macroscópica vem agora na forma:

$$\int_{\Omega} E_{ijk}^H \frac{\partial u_k^0(\mathbf{x})}{\partial x_m} \frac{\partial v_i(\mathbf{x})}{\partial x_j} d\Omega = \int_{\Omega} \langle b_i \rangle v_i(\mathbf{x}) d\Omega + \int_{\Gamma_t} t_i v_i(\mathbf{x}) d\Gamma, \quad \forall \mathbf{v} \in V_{\Omega} \quad (2.26)$$

Esta equação traduz o problema de equilíbrio (2.11) homogeneizado, sendo o tensor das constantes elásticas homogeneizado dado por:

$$E_{ijk}^H = \frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} \left(E_{ijk} - E_{ijrs} \frac{\partial \chi_r^{km}}{\partial y_s} \right) dY = \frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} E_{ijrs} \left(\delta_{rk} \delta_{sm} - \frac{\partial \chi_r^{km}}{\partial y_s} \right) dY \quad (2.27)$$

Aqui δ_{ij} é o símbolo delta de Kronecker. Este tensor verifica as mesmas propriedades de simetria indicadas em (2.7). Estas propriedades homogeneizadas também se podem escrever sob uma forma simétrica dada por:

$$E_{ijk}^H = \frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} E_{pqrs} \left(\delta_{rk} \delta_{sm} - \frac{\partial \chi_r^{km}}{\partial y_s} \right) \left(\delta_{pi} \delta_{qj} - \frac{\partial \chi_p^{ij}}{\partial y_q} \right) dY \quad (2.28)$$

Em (2.26) o vector de forças volúmicas homogeneizado é dado por:

$$\langle b_i \rangle = \frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} b_i dY \quad (2.29)$$

A equação (2.27) revela que as propriedades macroscópicas do material homogeneizado podem ser entendidas como uma média das propriedades da célula de base. Esta é uma média volumétrica (2.15) ponderada com informação característica da célula de base do meio periódico.

Uma vez que a parte homogeneizada \mathbf{u}^0 da solução de \mathbf{u}^{ε} seja conhecida, por resolução do problema equivalente (2.25), o termo \mathbf{u}^1 pode ser completamente caracterizado através de (2.22) – processo de localização. Termos de ordem superior na expansão assintótica (2.3) podem ser obtidos através da identificação e solução de problemas locais e globais adicionais que decorrem da consideração de outras potências de ε . Neste trabalho apenas se considera uma expansão até ao termo de primeira ordem, ou seja:

$$u_i^\varepsilon \approx u_i^0(\mathbf{x}) + \varepsilon u_i^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = u_i^0(\mathbf{x}) + \varepsilon \left(-\frac{\partial u_k^0(\mathbf{x})}{\partial x_m} \chi_i^{km}(\mathbf{y}) + \hat{u}_i^1(\mathbf{x}) \right) \quad (2.30)$$

Através de (2.30) pode ser agora realçado que no limite quando $\varepsilon \rightarrow 0$, a solução \mathbf{u}^ε converge para a solução homogeneizada \mathbf{u}^0 . Na aplicação da homogeneização a problemas de dimensão finita (ε fixo) existe um erro associado à aproximação de \mathbf{u}^ε por \mathbf{u}^0 .

O termo \mathbf{u}^0 é responsável pela caracterização macroscópica do deslocamento \mathbf{u}^ε (variação lenta) enquanto o termo \mathbf{u}^1 incorpora o carácter oscilatório da solução (variação rápida) pelo facto de existir uma microestrutura com periodidade Y na escala microscópica.

A figura 2.4 pretende resumir a ideia geral da homogeneização que consiste em tratar um domínio heterogéneo como um domínio homogéneo com propriedades equivalentes. Para isso o processo de homogeneização transfere informação da escala microscópica (onde são conhecidas as equações de equilíbrio e leis constitutivas) para a escala macroscópica através de coeficientes homogeneizados globais em cada ponto do modelo de EF do domínio macroscópico. A solução numérica do problema local, (2.23) ou (2.24), implica apenas uma discretização por EF no domínio da célula unitária. Na figura 2.4 ilustra-se um modo característico de deformação da célula (componente periódica). A solução do problema macroscópico equivalente (2.26) permite assim utilizar uma discretização por EF de dimensão inferior quando comparada com aquela que seria necessária para a solução do problema original (2.11) com a modelação do detalhe da microestrutura (comparem-se as ilustrações das figuras 2.2 e 2.4).

Depois da homogeneização do problema, o resultado de (2.22) pode ser utilizado para calcular as tensões microscópicas, ou seja, tensões no domínio da célula – processo de localização. No entanto, visto que os cálculos realizados no âmbito desta dissertação não utilizam esta informação, o leitor pode considerar um desenvolvimento mais detalhado sobre o cálculo destas tensões, por exemplo, em Guedes e Kikuchi (1990).

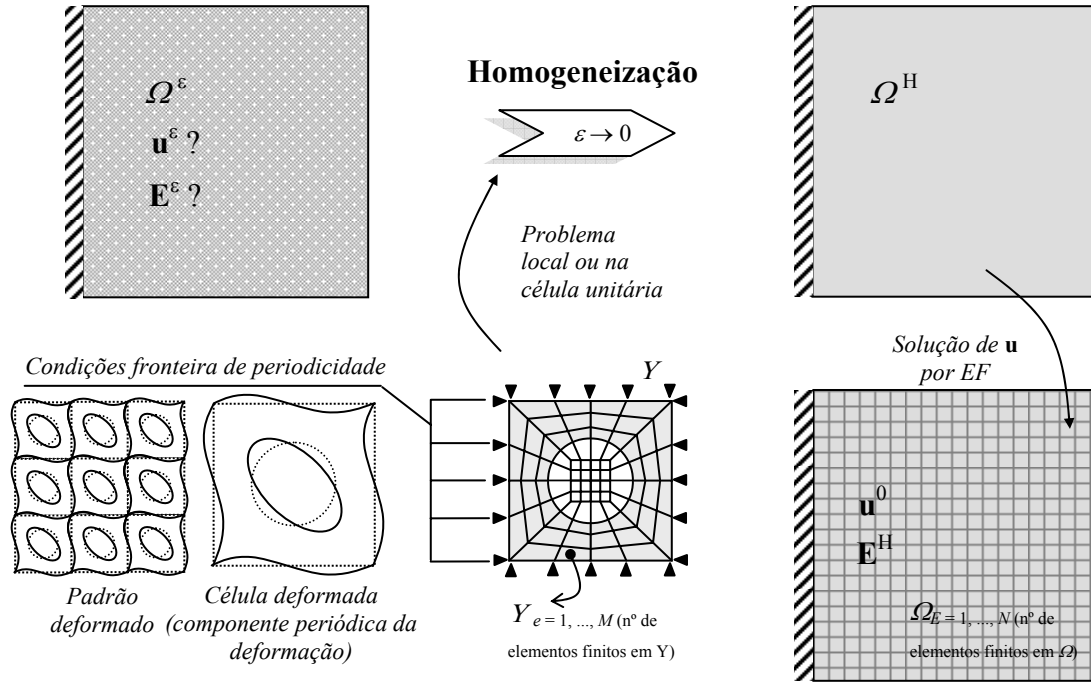


Figura 2.4. Ilustração do processo de homogeneização.

2.2.2. Problema de escoamento potencial

A homogeneização do problema de escoamento potencial φ segue basicamente os mesmos passos apresentados na secção anterior para o problema de elasticidade. Neste caso, o problema é caracterizado pela seguinte equação diferencial elíptica com condições de fronteira de fluxo imposto em $\Gamma_{\hat{q}}$ (condição de Neumann em que \mathbf{n} é a normal exterior à fronteira $\partial\Omega^\varepsilon$) e potencial imposto em Γ_φ (condição de Dirichlet):

$$\begin{aligned} \frac{\partial q_i^\varepsilon}{\partial x_j} + Q &= 0 \quad \text{em } \Omega^\varepsilon \\ q_i^\varepsilon n_i &= \hat{q} \quad \text{em } \Gamma_{\hat{q}} \\ \varphi^\varepsilon &= \hat{\varphi} \quad \text{em } \Gamma_\varphi \end{aligned} \tag{2.31}$$

Estas equações podem aplicar-se à descrição de fenómenos físicos caracterizados pelo escoamento de certa quantidade como, por exemplo, calor, massa, fluido (e.g. água) através de um meio poroso Ω^ε . O vector \mathbf{q} é o fluxo ou a taxa de transferência por unidade de área. A constante Q é a taxa à qual certa quantidade é gerada (ou removida) por unidade de volume. O potencial φ caracteriza um campo escalar (temperatura, pressão, etc). A equação diferencial em (2.31) traduz o requisito de continuidade ou equilíbrio de escoamento em regime

estacionário (independente do tempo). A equação (2.32) é uma lei constitutiva linear utilizada geralmente em problemas de escoamento potencial φ .

$$q_i^\varepsilon = -K_{ij}^\varepsilon \frac{\partial \varphi^\varepsilon}{\partial x_j} \quad (2.32)$$

Esta lei é muitas vezes referida como *Lei de Darcy*, *Fourier* ou *Fick* dependendo do problema físico em estudo, ou seja, problema de escoamento de fluido em meio poroso, condução de calor ou transferência de massa, respectivamente. Em cada um destes problemas os termos de (2.32) assumem o significado conforme mostrado na tabela 2.1. O sinal negativo em (2.32) traduz a realidade física de que o sentido do fluxo é das regiões de maior potencial para as de menor potencial.

Tabela 2.1. Significados de φ e \mathbf{K} dependendo do problema físico.

Problema	Potencial φ	Matriz \mathbf{K}
<i>Escoamento de fluido em meio poroso</i>	Pressão hidráulica	Permeabilidade
<i>Condução de calor</i>	Temperatura	Condutividade
<i>Transferência de massa</i>	Concentração	Difusão

No âmbito desta dissertação é considerado o fenómeno físico de escoamento de um fluido através de um meio periódico poroso caracterizado pela lei de Darcy. Esta lei é válida apenas para escoamento de um fluido Newtoniano incompressível, viscoso e laminar¹. Em (2.32) o gradiente $\nabla \varphi$ é designado por gradiente hidráulico (φ é pressão hidráulica). A matriz \mathbf{K} da permeabilidade dá uma medida da maior ou menor capacidade do meio poroso em escoar um fluido que o atravessa de um lado ao outro numa determinada direcção espacial. Esta matriz satisfaz as condições de simetria e de elipticidade (é positiva definida):

$$K_{ij}^\varepsilon = K_{ji}^\varepsilon \quad \text{e} \quad \exists_{\beta>0} : K_{ij}^\varepsilon \eta_i \eta_j = \beta \eta_i \eta_i, \forall \boldsymbol{\eta} \in \mathfrak{R}^3 \quad (2.33)$$

Uma curiosidade, digna de nota, é o facto de que a Lei de Darcy, embora tivesse sido inicialmente uma equação deduzida por Darcy² através de experimentação, é uma equação macroscópica que pode ser deduzida analiticamente a partir da homogeneização das equações

¹ Tipicamente qualquer escoamento caracterizado por número de Reynold's menor do que 1 é claramente laminar. Testes experimentais têm mostrado que regimes de escoamento com valores de nº de Reynold's até 10 podem ser considerados *Darcianos*.

² Henry Philibert Gaspard Darcy (1803-1858) foi um engenheiro francês que deu importantes contribuições na área da hidráulica.

de *Navier-Stokes* (Keller 1980, Terada e Kikuchi 1998, Sanchez-Palencia 1980, Rubinstein e Torquato 1989, Auriault 1991)¹.

O principal objectivo da presente secção será determinar uma matriz de permeabilidade \mathbf{K}^H de um meio homogéneo equivalente assim como se fez anteriormente para o tensor da elasticidade. Para o efeito, procedendo a substituições, o problema (2.31) pode ser reescrito na forma:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ij}^\varepsilon \frac{\partial \varphi^\varepsilon}{\partial x_j} \right) + Q &= 0 \quad \text{em } \Omega^\varepsilon \\ K_{ij}^\varepsilon \frac{\partial \varphi^\varepsilon}{\partial x_j} n_i &= \hat{q} \quad \text{em } \Gamma_{\hat{q}} \\ \varphi^\varepsilon &= \hat{\varphi} \quad \text{em } \Gamma_\varphi \end{aligned} \quad (2.34)$$

A formulação variacional deste problema é dada por (função de teste v):

$$\int_{\Omega^\varepsilon} K_{ij}^\varepsilon \frac{\partial \varphi^\varepsilon}{\partial x_j} \frac{\partial v}{\partial x_i} d\Omega = \int_{\Omega^\varepsilon} Q v d\Omega + \int_{\Gamma_{\hat{q}}} \hat{q} v d\Gamma, \quad \forall v \in V_{\Omega^\varepsilon} \quad (2.35)$$

Considere-se uma expansão assintótica até ao termo de primeira ordem:

$$\varphi^\varepsilon(\mathbf{x}) = \varphi^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon \varphi^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad \mathbf{y} = \frac{\mathbf{x}}{\varepsilon} \quad (2.36)$$

Introduzindo (2.36) em (2.35) e levando em conta (2.12), obtém-se:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega^\varepsilon} K_{ij}^\varepsilon \left\{ \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\partial \varphi^0}{\partial y_j} \frac{\partial v}{\partial y_i} + \right. \\ \left. + \frac{1}{\varepsilon^1} \left[\frac{\partial \varphi^0}{\partial y_j} \frac{\partial v}{\partial x_i} + \frac{\partial \varphi^0}{\partial x_j} \frac{\partial v}{\partial y_i} + \frac{\partial \varphi^1}{\partial y_j} \frac{\partial v}{\partial y_i} \right] + \right. \\ \left. + \varepsilon^0 \left[\frac{\partial \varphi^0}{\partial x_j} \frac{\partial v}{\partial x_i} + \frac{\partial \varphi^1}{\partial y_j} \frac{\partial v}{\partial x_i} + \frac{\partial \varphi^1}{\partial x_j} \frac{\partial v}{\partial y_i} \right] + \right. \\ \left. + \varepsilon^1(\dots) + \dots \right\} d\Omega = \int_{\Omega^\varepsilon} Q v d\Omega + \int_{\Gamma_{\hat{q}}} \hat{q} v d\Gamma, \quad \forall v \in V_{\Omega \times \mathbb{Y}} \end{aligned} \quad (2.37)$$

$$V_{\Omega \times \mathbb{Y}} = \left\{ v(\mathbf{x}, \mathbf{y}); (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \Omega \times \mathbb{Y} \mid v(\cdot, \mathbf{y}) \text{ Y-periódica}; \right. \\ \left. \text{suficientemente regular e } v|_{\Gamma_\varphi} = \hat{\varphi} \right\}$$

¹ Vejam-se ainda os trabalhos de Auriault and Lewandowska (1993), (1997) relacionados com a homogeneização do problema de difusão (Lei de Fick).

Nesta equação \mathbb{Y} representa a parte do domínio Y ocupada pelo fluido (Y_2 na figura 2.3). Igualando a zero os termos em (2.37) de mesma potência ε e aplicando o resultado de (2.14) assumindo que todas as funções são suficientemente regulares e tais que todos os integrais existem quando $\varepsilon \rightarrow 0$, obtêm-se os problemas (2.38) a (2.40), um por cada potência de ε :

$$\text{termo } \frac{1}{\varepsilon^2}: \int_{\Omega} \left(\frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} K_{ij} \frac{\partial \varphi^0}{\partial y_j} \frac{\partial v}{\partial y_i} dY \right) d\Omega = 0, \forall v \in V_{\Omega \times \mathbb{Y}} \quad (2.38)$$

$$\text{termo } \frac{1}{\varepsilon}: \int_{\Omega} \left(\frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} K_{ij} \left[\frac{\partial \varphi^0}{\partial y_j} \frac{\partial v}{\partial x_i} + \frac{\partial \varphi^0}{\partial x_j} \frac{\partial v}{\partial y_i} + \frac{\partial \varphi^1}{\partial y_j} \frac{\partial v}{\partial y_i} \right] dY \right) d\Omega = 0, \forall v \in V_{\Omega \times \mathbb{Y}} \quad (2.39)$$

$$\begin{aligned} \text{termo } \varepsilon^0: \int_{\Omega} \left(\frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} K_{ij} \left\{ \left[\frac{\partial \varphi^0}{\partial x_j} \frac{\partial v}{\partial x_i} + \frac{\partial \varphi^1}{\partial y_j} \frac{\partial v}{\partial x_i} + \frac{\partial \varphi^1}{\partial x_j} \frac{\partial v}{\partial y_i} \right] \right\} dY \right) d\Omega = \\ = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} Q v dY \right) d\Omega + \int_{\Gamma_i} \hat{q} v d\Gamma, \forall v \in V_{\Omega \times \mathbb{Y}} \end{aligned} \quad (2.40)$$

O problema (2.38), associado ao termo de potência ε^{-2} , resulta no seguinte problema local (no domínio da célula de base):

$$\frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} K_{ij} \frac{\partial \varphi^0}{\partial y_j} \frac{\partial v}{\partial y_i} dY = 0, \quad \forall v \in V_{\mathbb{Y}} \quad (2.41)$$

$$V_{\mathbb{Y}} = \{v(\mathbf{y}) \text{ definida em } \mathbb{Y} | v(\mathbf{y}) \text{ suficientemente regular, } Y\text{-periódica}\}$$

Este resultado, à semelhança de (2.19), permite concluir que:

$$\varphi^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \varphi^0(\mathbf{x}) \quad (2.42)$$

Usando este resultado no problema (2.39), associado ao termo de potência ε^{-1} , obtêm-se outro problema local dado por:

$$\int_{\mathbb{Y}} K_{ij} \frac{\partial \varphi^1}{\partial y_j} \frac{\partial w}{\partial y_i} dY = - \frac{\partial \varphi^0}{\partial x_j} \int_{\mathbb{Y}} K_{ij} \frac{\partial w}{\partial y_i} dY, \quad \forall w \in V_{\mathbb{Y}} \quad (2.43)$$

A solução φ^1 pode ser obtida por:

$$\varphi^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = - \frac{\partial \varphi^0(\mathbf{x})}{\partial x_m} \phi^m(\mathbf{y}) + \tilde{\varphi}^1(\mathbf{x}) \quad (2.44)$$

onde $\tilde{\varphi}^1$ é uma constante de integração em \mathbf{y} e ϕ^m são solução do problema local modificado:

$$\int_{\mathbb{Y}} K_{ij} \frac{\partial \phi^m}{\partial y_j} \frac{\partial v}{\partial y_i} dY = \int_{\mathbb{Y}} K_{im} \frac{\partial v}{\partial y_i} dY, \quad \forall v \in V_{\mathbb{Y}} \quad (2.45)$$

Observe-se que a estrutura de (2.45) pode assumir uma formulação de elementos finitos ($\mathbf{Ku} = \mathbf{f}$) apropriada para se obter uma solução numérica das incógnitas ϕ^m considerando condições de periodicidade. O vector ϕ^m é uma função Y -periódica (ϕ^m toma valores iguais em lados opostos do domínio Y) e pode ser interpretado como um campo de potencial obtido para o caso de carga m . Estes casos de carga podem ser vistos como gradientes de pressão aplicados em cada uma das três direcções cartesianas. Em problemas tridimensionais isto significa que são resolvidos três casos de carga para a obtenção dos vectores: ϕ^1, ϕ^2, ϕ^3 .

Seja o campo arbitrário de deslocamento \mathbf{v} no problema (2.40), associado ao termo de potência ε^0 , escolhido de tal forma que só depende da variável macroscópica $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x})$. Resulta então o seguinte problema:

$$\int_{\Omega} \left(\left[\frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} E_{ijk} \left(\frac{\partial \varphi^0}{\partial x_j} + \frac{\partial \varphi^1}{\partial y_j} \right) dY \right] \frac{\partial v(\mathbf{x})}{\partial x_i} \right) d\Omega = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} Q v dY \right) d\Omega + \int_{\Gamma_i} \hat{q} v d\Gamma, \quad \forall w \in V_{\Omega} \quad (2.46)$$

$$V_{\Omega} = \left\{ w(\mathbf{x}) \text{ definida em } \Omega \mid w \text{ suficientemente regular e } w|_{\Gamma_{\varphi}} = \hat{\varphi} \right\}$$

Substituindo a solução de φ^1 dada por (2.44) na equação (2.46), o problema de equilíbrio global ou na escala macroscópica vem agora na forma:

$$\int_{\Omega^e} K_{ij}^H \frac{\partial \varphi^0(\mathbf{x})}{\partial x_j} \frac{\partial v(\mathbf{x})}{\partial x_i} d\Omega = \int_{\Omega^e} Q v d\Omega + \int_{\Gamma_{\hat{q}}} \hat{q} v d\Gamma, \quad \forall v \in V_{\Omega^e} \quad (2.47)$$

Esta equação traduz o problema de equilíbrio (2.35) homogeneizado, sendo o tensor da permeabilidade homogeneizado dado por:

$$K_{im}^H = \frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} \left(K_{im} - K_{ij} \frac{\partial \phi^m}{\partial y_j} \right) dY = \frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} K_{ij} \left(\delta_{jm} - \frac{\partial \phi^m}{\partial y_j} \right) dY \quad (2.48)$$

Estas propriedades homogeneizadas também se podem escrever sob uma forma simétrica dada por:

$$K_{ij}^H = \frac{1}{|Y|} \int_{\mathbb{Y}} K_{sm} \left(\delta_{is} - \frac{\partial \phi^i}{\partial y_s} \right) \left(\delta_{mj} - \frac{\partial \phi^j}{\partial y_m} \right) dY \quad (2.49)$$

2.3. Formulação do problema de otimização hierárquica

Considerando o modelo material descrito na secção 2.1 e assumindo a rigidez estrutural como função objectivo, os campos de densidade macro $\rho(\mathbf{x})$ e microscópica $\mu(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ são solução do problema de otimização de topologia formulado do seguinte modo:

$$\min_{\rho, \mu} \left\{ \sum_{r=1}^P \alpha^r \left(\int_{\Omega} b_i^r u_i^r d\Omega + \int_{\Gamma_i^r} t_i^r u_i^r d\Gamma \right) \right\} \text{ onde } \sum_{r=1}^P \alpha^r = 1 \quad (2.50)$$

Sujeito a:

$$\int_{\Omega} E_{ijkl}^H e_{ij}(\mathbf{u}^r) e_{kl}(\mathbf{v}^r) d\Omega = \int_{\Omega} b_i^r v_i^r d\Omega + \int_{\Gamma_i^r} t_i^r v_i^r d\Gamma, \quad \forall \mathbf{v}^r \text{ admissível} \quad (2.51)$$

$$\int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}) d\Omega \leq V^*, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (2.52)$$

$$\rho(\mathbf{x}) = \frac{1}{|Y|} \int_Y \mu(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dY, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (2.53)$$

$$0 < \mu_{\min} \leq \mu(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq 1, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \text{ and } \forall \mathbf{y} \in Y(\mathbf{x}) \quad (2.54)$$

O problema (2.50) a (2.54) assume uma formulação multicarga, i.e., P casos de carga independentes, cada um com peso α^r (Diaz e Bendsøe 1992). Esta formulação considera a minimização em (2.50) do trabalho realizado pelas forças exteriores aplicadas (*compliance*). Assim, a solução deste problema resulta na estrutura mais rígida para o modelo de cargas múltiplas exteriores aplicadas.

No que diz respeito aos constrangimentos, a equação (2.51) corresponde ao conjunto das equações de equilíbrio do corpo elástico definido em Ω . O índice superior “H” para o tensor da elasticidade denota as propriedades homogeneizadas (equivalentes) do material celular (vejam-se as equações 2.27 ou 2.28). A equação (2.52) impõe um constrangimento global de volume ou um limite superior na quantidade de material usada em Ω . A equação (2.53) estabelece a dependência da densidade relativa global (macroscópica) ρ da densidade local (microscópica) μ , i.e., a quantidade de material no domínio na célula Y define a densidade relativa do material em cada ponto $\mathbf{x} \in \Omega$. Finalmente, a equação (2.54) define os constrangimentos laterais (limites superior e inferior) na variação da variável de densidade

microscópica μ . O valor de $\mu_{\min} \approx 0$ previne soluções numéricas instáveis ou singularidades conforme referido no capítulo 3 desta dissertação.

O conjunto das equações (2.50) a (2.54) corresponde a uma formulação *standard* que não evidencia explicitamente a estrutura hierárquica do problema de optimização a duas escalas. Para uma melhor compreensão, o problema de optimização hierárquica pode ser reformulado em dois subproblemas relacionados (Bendsøe e Sigmund 2003, Rodrigues *et al.* 2002, Coelho *et al.* 2008a):

$$\max_{\substack{\rho(\mathbf{x}) \\ 0 < \rho(\mathbf{x}) \leq 1 \\ \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}) d\Omega \leq V^*}} F(\rho) \quad \text{com } F(\rho) = \min_{\substack{\mathbf{u}^r \in U \\ r=1, \dots, P}} \left[\int_{\Omega} \Phi(\rho, \mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^P) d\Omega - \sum_{r=1}^P \alpha^r \left(\int_{\Omega} \mathbf{b}^r \cdot \mathbf{u}^r d\Omega + \int_{\Gamma_t^r} \mathbf{t}^r \cdot \mathbf{u}^r d\Gamma \right) \right] \quad (2.55)$$

$$\Phi(\rho, \mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^P) = \max_{\substack{\mu(\mathbf{y}) \\ 0 < \mu(\mathbf{y}) \leq 1 \\ \int_Y \mu(\mathbf{y}) dY = \rho(\mathbf{x})}} f(\mu) \quad \text{com } f(\mu) = \sum_{r=1}^P \alpha^r \left[\frac{1}{2} E_{ijkl}^H(\mu) e_{ij}(\mathbf{u}^r) e_{kl}(\mathbf{u}^r) \right] \quad (2.56)$$

O problema *max-min* (2.55) equivale à minimização da *compliance* (2.50) levando em conta que o problema de equilíbrio (2.51) pode ser expresso em termos do princípio da energia potencial mínima. Este problema *max-min* é o problema global relacionado com a distribuição espacial macroscópica de material em Ω que é parametrizado pelo campo de densidade relativa $\rho(\mathbf{x})$. O constrangimento de desigualdade no volume global estabelece um limite superior V^* para a quantidade de material usada em Ω .

O problema local (2.56) é a maximização pontual da densidade de energia de deformação para o campo de deformação $e(\mathbf{u})$ calculado no ponto $\mathbf{x} \in \Omega$. Este problema é no fundo um conjunto de problemas de maximização, ponto a ponto no domínio da estrutura Ω , de modo a obter-se a microestrutura mais rígida do material dentro da classe dos materiais celulares de densidade relativa igual a ρ . O campo de densidade $\mu(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ governa um problema de distribuição de material local, ou seja, no domínio Y da célula de base. Visto que a topologia da célula de base é solução de um problema de distribuição de material parametrizado por μ (sem restrições de simetria), este problema é conhecido usualmente por problema local anisotrópico (ver Sigmund 1999).

Em suma, a formulação (2.55) e (2.56) evidencia um problema de distribuição de material a duas escalas, i.e., escalas global ou macroscópica (domínio Ω da estrutura) e local ou

microscópica (domínio Y da célula de base do material). Portanto, a optimização da estrutura é feita de modo concorrente com a optimização do material de modo a obter-se a “melhor” estrutura com o “melhor” material dentro da classe dos compósitos admissíveis. Os problemas global e local estão acoplados através do termo da energia de deformação conforme se pode observar na fórmula da energia potencial em (2.55). Os métodos de interpolação entre a densidade e as propriedades elásticas do material são os métodos da homogeneização e SIMP para os problemas global e local, respectivamente.

Para a solução do problema global é calculado o tensor da elasticidade homogeneizado (ver também equação 2.28):

$$E_{ijkl}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y E_{ijkl}(\mu) \left(\delta_{kp} \delta_{lq} - \frac{\partial \chi_p^{kl}}{\partial y_q} \right) \left(\delta_{ih} \delta_{js} - \frac{\partial \chi_h^{ij}}{\partial y_s} \right) dY \quad (2.57)$$

Por um lado, este tensor depende dos modos de deformação ou deslocamentos χ_i^{km} (Y -periódicos), que são solução das equações de equilíbrio (2.23) definidas em Y (seis equações no caso tridimensional). Por outro lado, este tensor depende das propriedades elásticas do material da microestrutura E_{ijkl} , as quais são uma função da densidade local μ em Y através do modelo SIMP:

$$E_{ijkl}(\mu) = \mu^p E_{ijkl}^0, \quad p \in \mathbb{N} \quad (2.58)$$

Aqui o tensor E_{ijkl}^0 representa as propriedades elásticas do material base da microestrutura que é considerado linear isotrópico com módulo de elasticidade E^0 e coeficiente de Poisson ν :

$$E_{ijkl}^0 = \ell_1 \delta_{ij} \delta_{kl} + \ell_2 (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (2.59)$$

As constantes ℓ_1 e ℓ_2 são designadas por constantes de Lamé do material (ℓ_2 é identificado com o módulo de elasticidade transversal do material, G), que podem ser expressas a partir do Módulo de Young e do coeficiente de Poisson do material de base, E^0 e ν , por:

$$\ell_1 = \frac{E^0 \nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad ; \quad \ell_2 = \frac{E^0}{2(1+\nu)} \quad (2.60)$$

Acrescente-se ainda que a formulação “hierárquica” do problema (2.55) e (2.56) mantém-se quando se considera a solução do problema global de equilíbrio (problema de \min na equação 2.55) como parte de uma chamada a uma função (por exemplo, chamada a um código

comercial de elementos finitos). Nestes moldes o problema (2.55) é reformulado como (ver também Bendsøe e Sigmund, 2003):

$$\max_{\substack{\rho(\mathbf{x}) \\ 0 < \rho(\mathbf{x}) \leq 1 \\ \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}) d\Omega \leq V^*}} F(\rho) \quad \text{com } F(\rho) = - \int_{\Omega} \Phi(\rho, \mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^P) d\Omega \quad (2.61)$$

onde \mathbf{u} é solução de (2.51). A formulação (2.61) combinada com (2.56) é particularmente adequada na utilização de métodos de programação matemática para a obtenção da solução do problema de optimização hierárquica conforme salientado no capítulo 3 desta dissertação.

2.4. Condições de óptimo do problema

Para obter as condições necessárias de óptimo para o problema de optimização multiescala, são desenvolvidas as funções Lagrangeanas para cada um dos problemas, (2.55) e (2.56), e é procurada a estacionaridade de cada função em ordem às variáveis de projecto (densidades) e aos multiplicadores de Lagrange Λ e λ associados aos constrangimentos de volume global (2.52) e local (2.53), respectivamente. Os desenvolvimentos mostrados em seguida podem também ser vistos em Rodrigues *et al.* (2002) e Coelho *et al.* (2008a).

Definindo o multiplicador $\Lambda \geq 0$ como o multiplicador de Lagrange associado ao constrangimento de volume global em (2.52) e usando uma função de penalidade controlada por um parâmetro de penalidade constante c , a Lagrangeana Aumentada (Bazaraa *et al.* 1993; Luenberger 1989) do problema (2.55) é escrita do seguinte modo:

$$L = \min_{\substack{\mathbf{u}^r \in U \\ r=1, \dots, P}} \left[\int_{\Omega} \Phi(\rho, \mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^P) d\Omega - \sum_{r=1}^P \alpha^r \left(\int_{\Omega} \mathbf{b}^r \cdot \mathbf{u}^r d\Omega + \int_{\Gamma_t^r} \mathbf{t}^r \cdot \mathbf{u}^r d\Gamma \right) \right] - \frac{1}{2c} \left\{ \left[\max \left(0, \Lambda + c \left(\int_{\Omega} \rho d\Omega - V^* \right) \right) \right]^2 - \Lambda^2 \right\} \quad (2.62)$$

Seja $\hat{\mathbf{u}}^r$ o único campo de deslocamento que é solução do problema de *min* em (2.55) para o caso de carga r . Para estabelecer as condições necessárias a serem satisfeitas no ponto óptimo de projecto, determina-se a estacionaridade da função Lagrangeana em (2.62), primeiro em relação à variável de projecto $\rho(\mathbf{x})$:

$$\left\langle \frac{\partial \Phi(\rho, \hat{\mathbf{u}}^1, \dots, \hat{\mathbf{u}}^P)}{\partial \rho}, \delta \rho \right\rangle = \max \left[0, \Lambda + c \left(\int_{\Omega} \rho \delta \rho d\Omega - V^* \right) \right], \forall \mathbf{x} \in \Omega, \text{ quando } 0 < \rho < 1 \quad (2.63)$$

Esta condição deve ser satisfeita quando ρ toma valores intermédios, i.e., $\rho \in]0, 1[$. Quando ρ toma o valor limite “1” o sinal de igualdade na condição (2.63) passa a uma desigualdade do tipo “ \geq ” (maior do que ou igual), enquanto a desigualdade é do tipo “ \leq ” (menor do que ou igual) quando ρ iguala o valor limite “0”. Estas condições de desigualdade significam que, sempre que o constrangimento na variação de ρ esteja activo no ponto óptimo, o vector do gradiente deve ser igual a zero ou apontar para a região de projecto inadmissível pois pretende-se a maximização da função objectivo F em (2.55).

Agora, a estacionaridade de L relativamente ao multiplicador $\Lambda (\geq 0)$ implica:

$$\Lambda = \max \left[0, \Lambda + c \left(\int_{\Omega} \rho d\Omega - V^* \right) \right] \quad (2.64)$$

Resumindo, no ponto óptimo e para o campo de deslocamento na situação de equilíbrio $\hat{\mathbf{u}}^P$, a condição (2.64) traduz a satisfação do constrangimento de volume global (2.52) e a condição (2.63) significa que a derivada (ou taxa de variação) da soma ponderada das densidades de energia de deformação relativamente à variável de projecto ρ é constante para todo o $\mathbf{x} \in \Omega$ onde $\rho \in]0, 1[$.

No que diz respeito ao problema local (2.56), a Lagrangeana Aumentada é escrita do seguinte modo:

$$L = \sum_{r=1}^P \alpha^r \left[\frac{1}{2} E_{ijkl}^H(\mu) e_{ij}(\hat{\mathbf{u}}^r) e_{kl}(\hat{\mathbf{u}}^r) \right] - \lambda(\mathbf{x}^*) \left[\int_{Y(\mathbf{x}^*)} \mu(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dY - \rho(\mathbf{x}^*) \right] \quad (2.65)$$

em cada ponto $\mathbf{x}^* \in \Omega$. Note-se que λ (função de $\mathbf{x}^* \in \Omega$) é o multiplicador de Langrange associado ao constrangimento de volume local (2.53).

Seja $\hat{\chi}$ o único campo de deslocamentos (Y -periódico) solução do conjunto das equações de equilíbrio (2.23) resolvidas no domínio da célula Y . Neste caso, a estacionaridade de L relativamente à variável de densidade microscópica μ resulta na condição (2.66) a ser satisfeita em todos os y 's em Y sempre que $\mu \in]0, 1[$.

$$\sum_{r=1}^P \alpha^r \left[\frac{1}{2} \left\langle \frac{\partial E_{ijkl}^H(\mu)}{\partial \mu}, \delta \mu \right\rangle e_{ij}(\hat{\mathbf{u}}^r) e_{kl}(\hat{\mathbf{u}}^r) \right] = \lambda(\mathbf{x}^*) \quad \forall y \in Y(\hat{\mathbf{x}}), \text{ onde } 0 < \mu < 1 \quad (2.66)$$

Em (2.66) o gradiente das propriedades elásticas homogeneizadas relativamente a μ é dado por (2.67). Neste resultado foi levado em conta a relação (2.58), para mais detalhes veja-se a análise de sensibilidade em Bendsøe e Sigmund (2003) e Guedes *et al.* (2003).

$$\left\langle \frac{\partial E_{ijkl}^H(\mu)}{\partial \mu}, \delta \mu \right\rangle = \int_Y \frac{1}{|Y|} p \mu^{p-1} E_{ijkl}^0(\mu) \left(\delta_{kp} \delta_{lq} - \frac{\partial \hat{\chi}_p^{kl}}{\partial y_q} \right) \left(\delta_{ih} \delta_{js} - \frac{\partial \hat{\chi}_h^{ij}}{\partial y_s} \right) \delta \mu dY \quad (2.67)$$

Se a densidade μ toma os valores limite, 0 ou 1, o sinal de igualdade na condição (2.66) passa a uma desigualdade conforme já comentado para (2.63) pois, mais uma vez, pretende-se a maximização, neste caso da função objectivo f em (2.56).

Visto que, $\Phi(\rho, \hat{\mathbf{u}}^1, \dots, \hat{\mathbf{u}}^P)$ é o valor da função objectivo do problema local no óptimo então resulta que (ver Fletcher 1987 ou Luenberger 1989):

$$\left\langle \frac{\partial \Phi(\rho, \hat{\mathbf{u}}^1, \dots, \hat{\mathbf{u}}^P)}{\partial \rho}, \delta \rho \right\rangle = \lambda(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (2.68)$$

Substituindo este resultado em (2.63) vem:

$$\lambda(\mathbf{x}) = \max \left[0, A + c \left(\int_{\Omega} \rho d\Omega - V^* \right) \right], \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad \text{quando } 0 < \rho < 1 \quad (2.69)$$

Note-se que o segundo membro de (2.69) é constante em Ω . Isto significa que na solução óptima o multiplicador de Lagrange associado ao constrangimento de volume local (2.53) é constante em todo o domínio de projecto Ω onde $\rho \in]0, 1[$.

O resultado em (2.68) pode ser agora utilizado para condensar as condições de óptimo (2.63) e (2.66) numa só:

$$\sum_{r=1}^P \alpha^r \left[\left\langle \frac{\partial E_{ijkl}^H(\mu)}{\partial \mu}, \delta \mu \right\rangle e_{ij}(\hat{\mathbf{u}}^r) e_{kl}(\hat{\mathbf{u}}^r) \right] = 2A, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \wedge \forall \mathbf{y} \in Y(\mathbf{x}), \text{ onde } 0 < \mu < 1 \quad (2.70)$$

Portanto, em suma, as condições de optimalidade do problema de optimização hierárquica (2.55) e (2.56) podem ser resumidas através das equações (2.53), (2.64) e (2.70) com derivada (2.67).

2.5. Síntese de materiais

A síntese de materiais abordada nesta secção consiste apenas na resolução do problema local anisotrópico, ou seja, no domínio Y da célula de base cuja repetição espacial gera um material celular periódico. Os critérios de optimização do material considerados aqui são de rigidez estrutural e de permeabilidade, secções 2.5.1 e 2.5.2, respectivamente.

Amiúde, a aplicação de compósitos em estruturas mecânicas requer a satisfação de constrangimentos de fabrico ou funcionais. Portanto, existe todo o interesse em formular o problema de optimização do material como um problema constrangido, não só nos limites de variação das variáveis projecto ou de fracção volúmica de material disponível, mas também nos limites impostos a determinadas funções que descrevem alguma medida funcional ou de fabrico. Por exemplo, no âmbito desta dissertação são considerados dois tipos de constrangimentos locais adicionais, constrangimento de perímetro/superfície (secção 2.5.3.1) e de permeabilidade (secção 2.5.3.2). Conforme se verá nos capítulos 5 e 6 da dissertação, dedicados ao problema da remodelação óssea, estas medidas de perímetro/superfície e de permeabilidade e, respectivo controlo, têm todo o interesse na caracterização de fenómenos biológicos.

2.5.1. Maximização da rigidez do material

As equações anteriores (2.55) e (2.56) mostram bem a estrutura hierárquica do problema de optimização de estruturas a duas escalas. No entanto, em algumas aplicações, pode apenas existir interesse no projecto de um material sem necessidade da definição do *lay-out* da estrutura e do material em cada ponto. Neste caso, sob condições particulares de carga conhecidas, \mathbf{e}' , e fracção volúmica de material disponível fixa, ρ^* , apenas se considera a resolução do problema local anisotrópico de distribuição de material (2.56):

$$\max_{\substack{\mu(\mathbf{y}) \\ 0 < \mu(\mathbf{y}) \leq 1 \\ \int_Y \mu(\mathbf{y}) dY \leq \rho^*}} \sum_{r=1}^P \alpha^r \left[\frac{1}{2} E_{ijkl}^H(\mu) e'_{ij}(\mathbf{u}^r) e'_{kl}(\mathbf{u}^r) \right] \quad (2.71)$$

O tensor \mathbf{E}^H é calculado através das fórmulas de homogeneização apresentadas na secção 2.2. A homogeneização é inversa pois, em vez de ser usada para calcular as propriedades de um material definido, é utilizada para definir o material. O tensor \mathbf{e}' caracteriza campos admissíveis de deformação a que o material poderá estar sujeito sob carga (cargas normais

uniaxiais, biaxiais, triaxiais e/ou de corte). Pretende-se então determinar o material (classe de compósitos celulares) mais rígido para o carregamento aplicado.

Alguns trabalhos de optimização do material de acordo com a formulação (2.71) ou utilizando outros critérios de projecto podem ser consultados em: Neves *et al.* (2000), (2002); Gibiansky e Sigmund (2000); Sigmund (1994), (1995), (1999), (2000); Sigmund e Torquato (1997), Guedes *et al.* (2003), Paulino *et al.* (2008); Diaz e Bernard (2003).

2.5.2. Maximização da permeabilidade do material

Considere-se o problema de maximizar a permeabilidade de um determinado meio poroso considerando um constrangimento de quantidade mínima de material disponível. Observando, novamente, o domínio Y de uma célula de base caracterizando um material de microestrutura periódica, o problema formula-se do seguinte modo (veja-se também Guest e Prévost 2006, 2007; Bendsøe e Sigmund 2003):

$$\max_{\substack{\mu(y) \\ 0 < \mu(y) \leq 1 \\ \int_Y \mu(y) dy \geq \rho'}} \sum_{i=1}^n K^H_{ii}(\mu) \quad (2.72)$$

Aqui, a função objectivo é a soma das componentes da diagonal do tensor da permeabilidade homogeneizado. Pretende-se assim uma maximização da permeabilidade em cada uma das direcções espaciais do referencial, y_1 , y_2 e y_3 , assumindo isotropia. A permeabilidade máxima ocorreria para a solução de vazio ou ausência de material, pelo que, é imposto um constrangimento de quantidade mínima de material. A quantificação da permeabilidade é feita recorrendo às fórmulas da homogeneização apresentadas na secção 2.2.2. Em (2.49) o tensor homogeneizado K^H_{ij} depende do tensor K_{ij} das propriedades de permeabilidade do material base da célula. À semelhança do que foi considerado em (2.58), a interpolação entre densidade e permeabilidade é também dada por uma lei de potência, ou seja, neste caso:

$$K_{ij}(\mu) = (1 - \mu)^p K^0_{ij}(\mu), \quad p \in \mathbb{N} \quad (2.73)$$

O tensor \mathbf{K}^0 é assumido isotrópico com componentes na diagonal unitárias. Na lei de potência p , o argumento, em vez de ser a densidade μ , é a porosidade $1 - \mu$. Isto permite quantificar a permeabilidade do meio periódico poroso conforme explicado em seguida. Uma solução de densidade nula (vazio) para $\forall y \in Y$ implica permeabilidade máxima igual a 1

(100%) enquanto uma solução de densidade 1 (sólido) para $\forall \mathbf{y} \in Y$ implica permeabilidade mínima de aproximadamente 0 ($\approx 0\%$). No caso das densidades intermédias, considera-se então que sub-regiões de Y com baixa densidade apresentam elevada permeabilidade e vice-versa.

No caso do problema (2.72) ser resolvido por um método de programação matemática é necessário calcular o gradiente das propriedades elásticas homogeneizadas relativamente a μ . Este resultado é dado em (2.74) onde foi levada em conta a relação (2.73), para mais detalhes veja-se a análise de sensibilidade em Carvalho (2007).

$$\left\langle \frac{\partial K_{ij}^H}{\partial \mu}, \delta \mu \right\rangle = \frac{1}{|Y|} \int_Y (1-\mu)^{p-1} K_{sm}^0(\mu) \left(\delta_{is} - \frac{\partial \phi^i}{\partial y_s} \right) \left(\delta_{mj} - \frac{\partial \phi^j}{\partial y_m} \right) \delta \mu dY \quad (2.74)$$

2.5.3. Constrangimentos de projecto na microestrutura

Considere-se novamente o problema local anisotrópico (2.71). Agora, pretende-se acrescentar ao constrangimento de volume local, constrangimentos do tipo $g_i' - g_i(\mu) \leq 0$, onde g_i representa uma função de medida de perímetro/superfície ou de permeabilidade e g_i' um valor limite dessas quantidades medidas. A formulação do problema local apresenta-se agora como:

$$\begin{aligned} \max_{\substack{\mu(\mathbf{y}) \\ 0 < \mu(\mathbf{y}) \leq 1 \\ \int_Y \mu(\mathbf{y}) dY \leq \rho' \\ g_i' - g_i(\mu) \leq 0}} \sum_{r=1}^P \alpha^r \left[\frac{1}{2} E_{ijkl}^H(\mu) e'_{ij}(\mathbf{u}^r) e'_{kl}(\mathbf{u}^r) \right] \end{aligned} \quad (2.75)$$

2.5.3.1. Perímetro/Superfície

O perímetro de uma estrutura é definido como a medida da fronteira $|\partial \Omega_S|$ da região sólida Ω_S . O perímetro é igual à área de superfície total da fronteira de Ω_S em problemas tridimensionais e igual ao comprimento de arco total da fronteira de Ω_S em problemas bidimensionais.

O problema de optimização de topologia é por natureza um problema discreto. A sua relaxação consiste em parametrizar o espaço de projecto através de variáveis contínuas de densidade e determinar as propriedades elásticas em cada ponto através de interpolação

utilizando, por exemplo, os métodos da homogeneização ou SIMP. Esta relaxação do problema implica a existência de zonas com densidades intermédias (material poroso) e, adicionalmente, podem surgir zonas de xadrez (*checkerboard*)¹. Para superar este problema, Haber *et al.* (1994) propõem considerar um constrangimento de perímetro em estruturas bidimensionais. Nesta abordagem, o efeito de introduzir um constrangimento de valor máximo no perímetro, corresponde a limitar o número de furos ou vazios de material na solução final de topologia da estrutura. Um menor perímetro implica, para a mesma área de vazio, um menor número de furos na topologia. Alguns trabalhos fazendo aplicação do perímetro nestes moldes são: Haber *et al.* (1994), (1996); Fernandes *et al.* (1999a); Beckers (1999); Zhou *et al.* (2001); Jog (2002). Embora este uso do perímetro seja frequente, sublinha-se que no âmbito desta dissertação a intenção de controlar o perímetro serve o propósito de garantir a satisfação de um valor mínimo dessa quantidade como um requisito funcional ou de fabrico no projecto das microestruturas (2.75). Para minimizar o efeito de xadrez, recorre-se nesta dissertação a uma técnica de filtro conforme explicado mais à frente no capítulo 3.

Considerando o modelo de material poroso em optimização de topologia de estruturas, o perímetro não pode ser determinado utilizando a definição dada acima pois as topologias obtidas caracterizam-se não só por regiões sólidas ou vazias, mas também por zonas com densidades intermédias. Neste caso, torna-se necessário considerar uma medida de perímetro compatível (ver Haber *et al.* 1994, 1996). Para tal, considere-se que a variação de uma função μ contínua por troços é obtida por:

$$\int_{\Omega} |\nabla \mu| d\Omega + \int_{\Gamma_J} \{\mu\} d\Gamma \quad (2.76)$$

No problema de optimização de topologia, μ representa a função de densidade relativa microscópica de material e $\{\mu\}$ o seu salto. A fronteira Γ_J é a fronteira de descontinuidade, ou seja, as faces de cada elemento finito no caso de se utilizar uma discretização do problema por EF. Com base nesta variação, uma medida possível para o perímetro é:

$$g_1(\mu) = \int_{\Omega} \left[\left(\nabla \mu \nabla \mu + \left(\frac{\omega}{z} \right)^2 \right)^{1/2} - \frac{\omega}{z} \right] d\Omega + \int_{\Gamma_J} \left[\left(\{\mu\}^2 + \omega^2 \right)^{1/2} - \omega \right] d\Gamma \quad (2.77)$$

¹ Zonas intercaladas de baixa e elevada rigidez, i.e., de densidade 0 e 1 definindo assim um padrão característico de uma mesa de jogo de xadrez (ver Diaz and Sigmund, 1995; Jog and Haber, 1996).

onde $\omega > 0$ garante a diferenciabilidade de $g_1(\mu)$ e z é uma dimensão característica da malha de elementos finitos. Adoptando esta definição, observe-se que, quando as zonas de material poroso tendem a desaparecer, *i.e.*, quando existem unicamente zonas de material cheio ou vazio, o perímetro $|\partial\Omega_S|$, como medida da fronteira da região sólida, é recuperado.

Nesta dissertação considera-se que a função densidade relativa é constante por troços e, portanto, $\nabla\mu = 0$. Esta simplificação significa utilizar no modelo discretizado densidade relativa constante em cada elemento finito. Sendo assim, a equação (2.77) escreve-se agora de forma simplificada:

$$g_1(\mu) = \int_{\Gamma_j} \left[\left(\mu^2 + \omega^2 \right)^{1/2} - \omega \right] d\Gamma \quad (2.78)$$

2.5.3.2. Permeabilidade

Na secção anterior 2.5.2 a permeabilidade foi considerada como parte integrante da função objectivo do problema de optimização. Nesta secção, a permeabilidade é encarada como um constrangimento de projecto das microestruturas do tipo $g_i' - g_i(\mu) \leq 0$. O valor de g_i' estabelece neste caso um valor de permeabilidade mínima. A função $g_i(\mu)$ corresponde a uma medida da permeabilidade que envolve o cálculo das componentes do tensor da permeabilidade homogeneizado \mathbf{K}^H (2.49).

Recorde-se a equação (2.32) agora escrita na sua forma matricial:

$$\mathbf{q} = \mathbf{K}^H \nabla \varphi \Leftrightarrow \begin{Bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} k_{11}^H & k_{12}^H & k_{13}^H \\ k_{21}^H & k_{22}^H & k_{23}^H \\ k_{31}^H & k_{32}^H & k_{33}^H \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \nabla \varphi_1 \\ \nabla \varphi_2 \\ \nabla \varphi_3 \end{Bmatrix} \quad (2.79)$$

De acordo com o modelo SIMP (2.73) e as considerações tecidas na secção 2.5.2, \mathbf{K}^H é uma matriz diagonal unitária na situação de ausência de material ($\rho \approx 0$) e é uma matriz nula no caso sólido ($\rho = 1$). Atendendo a estas duas situações extremas e sendo aplicado um gradiente de pressão $\nabla \varphi$ unitário de direcção espacial arbitrária, a resultante do fluxo \mathbf{q} terá quando muito uma intensidade $|\mathbf{q}|$ máxima igual à unidade (diz-se que a permeabilidade do meio é máxima ou de 100%) e uma intensidade mínima aproximadamente nula (diz-se que a permeabilidade do meio é mínima ou $\approx 0\%$). Para uma situação de densidade ρ intermédia a permeabilidade do meio pode ser caracterizada pela intensidade do vector fluxo que assume

valores entre 0 e 1, i.e., 0% e 100%, respectivamente. Raciocinando nestes termos, o constrangimento de permeabilidade poderia ser imposto no problema (2.75) como um conjunto de equações (2.79) em que se impõe como requisito um fluxo $\mathbf{q}^* = \kappa \nabla \varphi^*$, onde $\kappa \in]0,1[$ é uma fracção que em termos percentuais caracteriza a permeabilidade do meio e $\nabla \varphi^*$ é definido como um vector unitário na direcção espacial para a qual se pretende a permeabilidade κ . Uma outra hipótese de restrição de permeabilidade no projecto das microestruturas é considerar que se pretende uma permeabilidade mínima em qualquer direcção espacial. Isto é imposto requerendo que as componentes da diagonal k_{ii} sejam todas maiores ou iguais a um valor definido κ e todas as outras (fora da diagonal) nulas ($k_{ij, i \neq j} = 0$). Este tipo de constrangimentos caracteriza um tensor \mathbf{K} da permeabilidade ortotrópico ou isotrópico (no caso particular de k_{ii} iguais).

Sublinhe-se que os coeficientes k_{ij}^H são funções de μ e, portanto, a homogeneização é feita de forma inversa, as propriedades de permeabilidade são calculadas de modo a obter-se um tensor \mathbf{K}^H com determinadas relações entre os seus coeficientes (por ex., isotropia, ortotropia, etc).

2.5.4. Medida da anisotropia do material

O problema local anisotrópico (2.56) ou (2.71), tal como o nome indica, conduz a soluções de microestruturas anisotrópicas. Com o objectivo de obter uma representação gráfica de tal anisotropia, o tensor de quarta ordem da elasticidade homogeneizado \mathbf{E}^H é invertido para obter o tensor da flexibilidade \mathbf{C}^H . Esta inversão pode ser realizada levando em conta que (Ottosen e Ristinmaa 2005):

$$E_{ijmn}^H C_{mnkl}^H = \frac{1}{2} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (2.80)$$

onde δ_{ij} é delta de Kronecker. Uma vez que o tensor \mathbf{C}^H esteja calculado, este pode ser rodado no espaço utilizando ângulos de *Euler* de modo a obter-se \mathbf{C}'^H , ou seja:

$$C_{mnkl}'^H = R_{im} R_{jn} R_{kp} R_{lq} C_{mnpq}^H \quad (2.81)$$

O tensor de rotação \mathbf{R} é definido em termos dos ângulos de *Euler*, θ_i :

$$R_{ij}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\theta_1) & \sin(\theta_1) \\ 0 & -\sin(\theta_1) & \cos(\theta_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta_2) & 0 & \sin(\theta_2) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\theta_2) & 0 & \cos(\theta_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta_3) & \cos(\theta_3) & 0 \\ -\sin(\theta_3) & \cos(\theta_3) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.82)$$

Nesta multiplicação matricial, da direita para a esquerda, a primeira matriz corresponde a uma rotação de θ_3 em torno do eixo x_3 de um referencial cartesiano $OX_1X_2X_3$. Desta rotação resulta o referencial rodado $OX'_1X'_2X'_3$. Depois, a segunda matriz traduz uma rotação de θ_2 em torno do eixo x'_2 , obtendo-se $OX''_1X''_2X''_3$. A terceira matriz roda este último referencial θ_1 em torno do eixo x''_1 de modo a obter-se $OX'''_1X'''_2X'''_3$.

À medida que se executa o varrimento dos ângulos de *Euler* calcula-se a componente C_{1111}^H do tensor da flexibilidade, mas o que se representa graficamente é o seu inverso, i.e., $1/C_{1111}^H$. Este gráfico pode ser interpretado como a variação da rigidez do material medida em múltiplos ensaios de tracção uniaxial (sendo válida a relação $\sigma'_{11} = (1/C_{1111}^H)e'_{11}$), cada ensaio executado na direcção 11 que vai rodando com os ângulos de Euler. Portanto, $1/C_{1111}^H$ tem o significado de uma rigidez direcciona. No caso particular de um material isotrópico, $1/C_{1111}^H$ é igual ao Módulo de *Young* ou de Elasticidade do material e o gráfico correspondente é uma esfera.

2.6. Optimização hierárquica com constrangimentos locais

Em vez da formulação dada por (2.55) e (2.56), considere-se agora a seguinte formulação para o problema de optimização hierárquica:

$$\max_{\substack{\rho(\mathbf{x}) \\ 0 < \rho(\mathbf{x}) \leq 1 \\ \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}) d\Omega \leq V^*}} F(\rho) \quad \text{com } F(\rho) = - \int_{\Omega} \Phi(\rho, \mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^P) d\Omega \quad (2.83)$$

$$\Phi(\rho, \mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^P) = \max_{\substack{\mu(\mathbf{y}) \\ 0 < \mu(\mathbf{y}) \leq 1 \\ \int_Y \mu(\mathbf{y}) dY = \rho \\ \mathbf{g}(\mu) \leq \mathbf{g}'(\rho)}} f(\mu) \quad \text{com } f(\mu) = \sum_{r=1}^P \alpha^r \left[\frac{1}{2} E_{ijkl}^H(\mu) e_{ij}(\mathbf{u}^r) e_{kl}(\mathbf{u}^r) \right] \quad (2.84)$$

onde o campo \mathbf{u} é solução do problema de equilíbrio global (2.51).

Nesta formulação, (2.83) resulta da substituição de (2.55) por (2.61). Em (2.84) a única diferença relativamente a (2.56) é a introdução dos constrangimentos locais $\mathbf{g}(\mu) \leq \mathbf{g}'(\rho)$. Basicamente, nesta secção pretende-se calcular as sensibilidades das funções F e f relativamente às variáveis de densidade macro e microscópica, respectivamente. Este é um resultado importante na utilização de métodos de programação matemática para resolver o problema (2.83) e (2.84). Estes métodos necessitam da informação de sensibilidade da função objectivo, bem como dos constrangimentos, relativamente às variáveis de projecto.

Observando (2.83), a sensibilidade de F relativamente a ρ implica a derivada da densidade de energia de deformação Φ relativamente a esta variável. Esta variável ρ conduz a variações dos requisitos dos constrangimentos do problema local (2.84), veja-se o segundo membro dos constrangimentos (funções de ρ). O teorema das sensibilidades (ver Fletcher 1987 ou Luenberger 1989) pode ser invocado aqui para determinar o gradiente ou a taxa de incremento na variação do valor de Φ por unidade de variação de ρ . Concretamente, este teorema diz o seguinte:

Seja $\psi, \mathbf{h} \in C^2$ e considere-se a família de problemas:

$$\begin{aligned} &\text{minimizar } \psi(\mathbf{x}) \\ &\text{sujeito a: } \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{a} \end{aligned} \quad (2.85)$$

Suponha-se que para $\mathbf{a} = 0$ existe a solução local \mathbf{x}^ que é um ponto regular e que, em conjunto com o vector do multiplicador de Lagrange associado λ , satisfaz as condições suficientes de segunda ordem para existência de um mínimo local estrito. Então para qualquer $\mathbf{a} \in R^n$ numa região contendo 0 existe um $\mathbf{x}(\mathbf{a})$, dependendo continuamente de \mathbf{a} , tal*

que $\mathbf{x}(\mathbf{0}) = \mathbf{x}^*$ e tal que $\mathbf{x}(\mathbf{a})$ é um mínimo local de (2.85). Além disso, aplica-se o seguinte resultado:

$$\nabla_{\mathbf{a}} \psi(\mathbf{x}(\mathbf{a})) \Big|_{\mathbf{a}=\mathbf{0}} = -\boldsymbol{\lambda}^T \quad (2.86)$$

Este resultado (2.86) já foi utilizado anteriormente em (2.68) na dedução das condições de óptimo do problema (2.55) e (2.56) que apenas considerava como constrangimento local a relação de densidades dada por (2.53). No entanto, agora há que levar em conta os constrangimentos adicionais locais do tipo $\mathbf{g}(\mu) \leq \mathbf{g}'(\rho)$.

A sensibilidade de $F(\rho)$ em (2.83) será calculada seguindo os passos que constituem a prova do teorema das sensibilidades (ver Luenberger 1989). No entanto, em vez de se considerar (2.85), considera-se agora a família de problemas com a seguinte descrição:

$$\begin{aligned} &\text{minimizar } \psi(\mathbf{x}) \\ &\text{sujeito a: } \begin{cases} h(\mathbf{x}) = a \\ g(\mathbf{x}) = g'(a) \end{cases} \end{aligned} \quad (2.87)$$

Aqui, a novidade relativamente a (2.85) é um requisito de constrangimento dado por uma função de a , $g'(a)$. Pretende-se, naturalmente, determinar $\nabla_{\mathbf{a}} \psi(\mathbf{x}(a)) \Big|_{a=0}$. Para tal, considere-se o sistema de equações:

$$\nabla L = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial \psi(\mathbf{x})}{\partial x_i} + \lambda_h \frac{\partial h(\mathbf{x})}{\partial x_i} + \lambda_g \frac{\partial g(\mathbf{x})}{\partial x_i} = 0 \quad (2.88)$$

$$h(\mathbf{x}) = a \quad (2.89)$$

$$g(\mathbf{x}) = g'(a) \quad (2.90)$$

A equação (2.88) traduz a estacionaridade da função Lagrangeana do problema (2.87) relativamente às variáveis de projecto x_i . Assume-se que existe uma solução \mathbf{x}^* , $\boldsymbol{\lambda}$ deste sistema quando $a = 0$. Pelo teorema da função implícita, existe uma solução $\mathbf{x}^*(a)$, $\boldsymbol{\lambda}(a)$ deste sistema que é de facto continuamente diferenciável. Pela regra da cadeia, tem-se:

$$\nabla_a \psi(\mathbf{x}(a)) \Big|_{a=0} = \nabla_{\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}^*) \nabla_a \mathbf{x}(0) \quad (2.91)$$

$$\nabla_a h(\mathbf{x}(a)) \Big|_{a=0} = \nabla_{\mathbf{x}} h(\mathbf{x}^*) \nabla_a \mathbf{x}(0) \quad (2.92)$$

$$\nabla_a g(\mathbf{x}(a)) \Big|_{a=0} = \nabla_{\mathbf{x}} g(\mathbf{x}^*) \nabla_a \mathbf{x}(0) \quad (2.93)$$

Partindo de (2.91), (2.92) e (2.93) obtêm-se (2.94), (2.95) e (2.96), respectivamente:

$$\frac{\partial \psi}{\partial a} = \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial a} \quad (2.94)$$

$$\frac{\partial h}{\partial a} = \frac{\partial h}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial a} = \frac{\partial a}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial a} = 1 \quad (2.95)$$

$$\frac{\partial g}{\partial a} = \frac{\partial g}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial a} = \frac{\partial g'}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial a} \quad (2.96)$$

Em (2.95) e (2.96) fizeram-se substituições utilizando os resultados (2.89) e (2.90), respectivamente. Introduzindo (2.88) em (2.94) e, depois, utilizando os resultados de (2.95) e (2.96), obtém-se:

$$\frac{\partial \psi}{\partial a} = \left[-\lambda_h \frac{\partial h(\mathbf{x})}{\partial x_i} - \lambda_g \frac{\partial g(\mathbf{x})}{\partial x_i} \right] \frac{\partial x_i}{\partial a} = -\lambda_h \frac{\partial h}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial a} - \lambda_g \frac{\partial g}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial a} = -\lambda_h - \lambda_g \frac{\partial g'}{\partial a} \quad (2.97)$$

Generalizando este resultado, obtém-se então a sensibilidade requerida:

$$\nabla_a \psi(\mathbf{x}(\mathbf{a})) \Big|_{\mathbf{a}=0} = -\boldsymbol{\lambda}_h^T - \boldsymbol{\lambda}_g^T \nabla_a \mathbf{g}' \quad (2.98)$$

No caso de problemas com constrangimentos de desigualdade $\mathbf{g} \leq \mathbf{g}'$, o resultado da sensibilidade é simplesmente a repetição de (2.98) acrescentando-se, porém, a hipótese de não degenerescência. Esta hipótese salvaguarda que pequenas variações nos multiplicadores de Lagrange produzidas quando se variam os respectivos constrangimentos não violam o requisito de positividade, *i.e.*, $\lambda's \geq 0$.

Considere-se ainda que, no teorema das sensibilidades, \mathbf{a} tem uma variação suficientemente pequena próxima do valor 0. No entanto, no problema (2.84), ρ pode assumir valores entre 0 e 1. Sendo assim, para aplicar o teorema anterior ao cálculo da sensibilidade de Φ quando ρ varia, considera-se, por um lado, que o requisito do constrangimento de fracção volúmica dado por ρ é afectado por a , *i.e.*, tem-se $\rho + a$. Por outro lado, a perturbação do requisito $g'(\rho)$ do constrangimento g em (2.84) é dada por $g'(\rho + a)$. Visto que ρ tem

apenas o efeito de translação sobre a , pode-se aplicar o resultado (2.98) a (2.84) do seguinte modo:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \rho} = \lambda_1 + \lambda_2 \frac{\partial g'(\rho)}{\partial \rho} \quad (2.99)$$

Note-se que (2.84) é um problema de maximização por isso os sinais negativos em (2.98) passaram a positivos em (2.99). Nesta última equação, os multiplicadores de Lagrange λ_1 e λ_2 estão associados aos constrangimentos de fracção volúmica e g , respectivamente. Finalmente, a sensibilidade da função objectivo global $F(\rho)$, ver (2.55), pode ser calculada por:

$$\left\langle \frac{\partial F(\rho)}{\partial \rho}, \delta \rho \right\rangle = \int_{\Omega} \left[\lambda_1 + \lambda_2 \frac{\partial g'(\rho)}{\partial \rho} \right] \delta \rho d\Omega \quad (2.100)$$

Observe-se agora que a verificação das condições de Karush-Kuhn Tucker (KKT) requerem que no óptimo a quantidade dada em (2.100) seja constante em todo o domínio Ω onde $0 < \rho < 1$.

Se o problema de optimização hierárquica é apenas constrangido no volume, caso do problema (2.55) e (2.56), então (2.100) simplifica-se na medida em que a derivada (2.99) é dada simplesmente por λ_1 , ou seja, recupera-se o resultado (2.86) do teorema que havia sido utilizado em (2.68).

O gradiente relacionado com o problema (2.84) relativamente à variável de densidade microscópica μ pode ser facilmente calculado analiticamente:

$$\left\langle \frac{\partial f(\mu)}{\partial \mu}, \delta \mu \right\rangle = \sum_{r=1}^P \alpha^r \left[\frac{1}{2} \left\langle \frac{\partial E_{ijkl}^H}{\partial \mu}, \delta \mu \right\rangle e_{ij}(\mathbf{u}^r) e_{kl}(\mathbf{u}^r) \right] \quad (2.101)$$

Em (2.101) e_{ij} são as deformações globais ou macroscópicas calculadas através da solução do problema de equilíbrio global (2.51) e o gradiente das constantes elásticas relativamente à densidade local μ é dado por (2.67).

Os resultados (2.100) e (2.101) são particularmente importantes aquando da utilização de métodos de programação matemática para a obtenção da solução do problema de optimização hierárquica conforme apresentado no capítulo seguinte.

Capítulo 3

Modelo Numérico e Algoritmos

3.1. Modelo numérico de elementos finitos

O problema de optimização hierárquica (2.83) e (2.84) definido nos domínios Ω e Y , respectivamente, é resolvido através de um modelo discreto baseado numa aproximação por elementos finitos (EF). Conforme mostrado na figura 3.1, duas malhas de EF são utilizadas: uma para as aproximações feitas em Ω e outra para as aproximações em Y . A malha em Ω é composta por elementos finitos macro/globais denotados por $\Omega^{E'}$ com $E' = 1, \dots, M$ (M , número total de EF-macro) que aproximam o campo de deslocamento global $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ e o campo de densidade relativa $\rho(\mathbf{x})$ do material celular. Por sua vez, $Y^{e'}$ denota o EF da malha micro/local, com $e' = 1, \dots, m$ (m , número total de EF-micro) que interpola os deslocamentos-micro $\chi(\mathbf{y})$ e o campo de densidade relativa $\mu(\mathbf{x})$ do material da célula de base. Os referenciais cartesianos global e local, onde são definidos respectivamente os vectores de posição \mathbf{x} e \mathbf{y} , apresentam a mesma orientação conforme indicado na figura 3.1.

Ambos os campos de deslocamento, \mathbf{u} e χ , são aproximados usando elementos finitos isoparamétricos sólidos de oito nós nas respectivas malhas. As variáveis de densidade são interpoladas constantes em cada elemento global $\Omega^{E'}$ ou local $Y^{e'}$, i.e., $\rho^{E'}$ e $\mu^{e'}$ são constantes nos respectivos elementos finitos. Uma consequência desta parametrização de projecto é que todos os pontos $\mathbf{x} \in \Omega^{E'}$, i.e. que pertencem ao mesmo EF-macro, apresentam a mesma microestrutura. Portanto, o número de problemas locais a ser resolvido é igual a M , e cada um pode ser resolvido separadamente, pois cada um depende somente da informação relativa ao respectivo EF-macro conforme se evidenciará na secção 3.2. Esta propriedade de

separabilidade é claramente favorável a uma implementação usando técnicas de processamento paralelo conforme descrito nas secções seguintes 3.2 e 3.3.

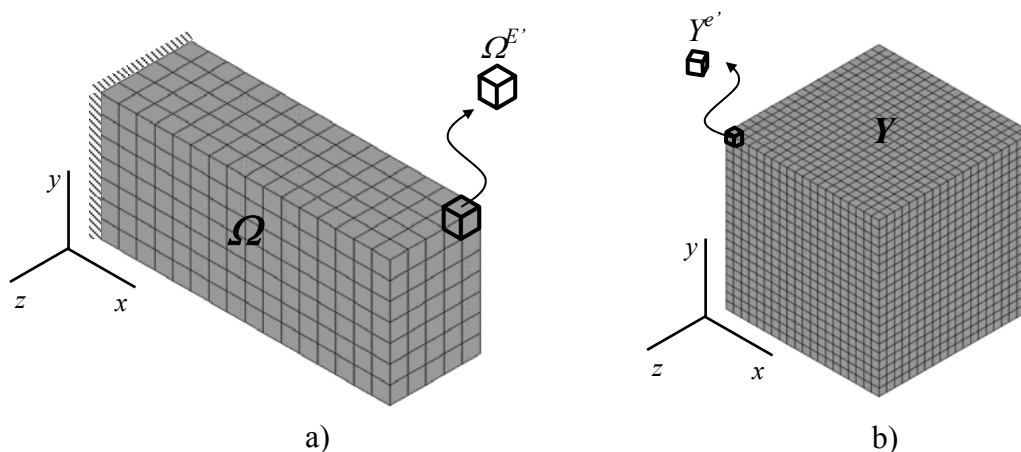


Figura 3.1. Malhas de elementos finitos: a) Domínio global (exemplo da viga em consola); b) Domínio local, com indicação das condições fronteira de periodicidade no deslocamento através da modelação por acoplamento de nós.

Um software comercial de elementos finitos (ANSYS¹) é utilizado para calcular o campo de deslocamento \mathbf{u} , solução do problema de equilíbrio global. Para este efeito o elemento finito Ω^E é anisotrópico, i.e., recebe como propriedades do material 21 constantes elásticas independentes (elemento do ANSYS designado de *SOLID64: 3-D Anisotropic Structural Solid*). Para resolver o problema de equilíbrio local (2.23) que consiste em determinar os χ 's é utilizado um programa (PREMAT) de elementos finitos adaptado e escrito em linguagem FORTRAN, elaborado originalmente por Guedes e Kikuchi (1990) e com extensão ao espaço tridimensional (PREMAT3D) conforme realizado por Guedes (1995). No âmbito desta dissertação, este programa foi apropriadamente adaptado para resolver problemas de homogeneização inversa para o caso de microestruturas anisotrópicas e respectivo cálculo de gradientes das constantes elásticas homogeneizadas. Uma adaptação do método dos elementos finitos em código FORTRAN também foi efectuada para resolver as equações de equilíbrio locais (2.45) associadas ao problema de escoamento potencial, cálculo de ϕ 's. O problema de elementos finitos gerado para a solução dos χ 's ou ϕ 's resulta num sistema de equações lineares que é resolvido recorrendo a um método iterativo – método dos gradientes conjugados com pré-condicionamento da matriz de rigidez global².

¹ <http://www.ansys.com/>

² Na literatura anglo-saxónica este método é conhecido por *Preconditioned Conjugate Gradient method* (PCG).

Cada problema local é baseado num mesmo domínio de projecto Y cúbico e unitário ($|Y|=1$) com malha de elementos finitos regular, $\varpi \times \varpi \times \varpi$ ou ϖ^3 elementos e $(\varpi+1) \times (\varpi+1) \times (\varpi+1)$ nós, conforme mostrado na figura 3.1b. No âmbito desta dissertação foram geradas e utilizadas 5 malhas: $10 \times 10 \times 10$, $20 \times 20 \times 20$, $30 \times 30 \times 30$, $40 \times 40 \times 40$ e $50 \times 50 \times 50$. A geração destas malhas foi realizada de forma automática recorrendo a programação em APDL (*Ansys Parametric Design Language*) e, nomeadamente, utilizando a potencialidade dos comandos NGEN e EGEN do ANSYS. A modelação das condições fronteira de periodicidade do problema local (deslocamentos χ , Y -periódicos) é realizada através de acoplamento de nós, primeiro entre nós das faces do cubo Y , depois entre nós das arestas e finalmente acoplando sete nós dos vértices a um oitavo nó, o qual tem deslocamento fixo (nulo). Visto que todas as malhas locais são iguais e que a interpolação local entre material e propriedades elásticas segue uma lei de potência (SIMP), as matrizes de rigidez de cada elemento associadas com o problema local podem ser obtidas calculando apenas uma delas e, depois, gerando as restantes por multiplicação com o valor da densidade μ no respectivo elemento. Este procedimento permite poupar tempo de computação.

Conforme referido em diversos trabalhos de optimização de topologia, podem surgir padrões de xadrez (*checkerboard*, alternância de valores de densidade 0 e 1, ou, “branco” e “preto”) em algumas áreas do projecto final, ver Diaz e Sigmund (1995) e Jog e Haber (1996). Este é um problema na definição topológica das estruturas cuja razão de existir se deve apenas à aproximação do problema por elementos finitos utilizando funções interpoladoras ou polinómios de baixo grau. No contexto da optimização hierárquica, este problema não é tão relevante no problema global como no problema local. No que diz respeito ao problema global, a solução esperada em Ω é um meio poroso onde a densidade ρ é igual à quantidade de material presente em cada domínio Y de microestrutura. Portanto, é plausível esperar que, à escala macroscópica, zonas “cinzentas” ($0 < \rho < 1$) coexistam com zonas de “preto” ($\rho = 1$) ou “branco” ($\rho = 0$). Pelo contrário, na solução de topologia da célula de base em Y pretende-se distinguir claramente zonas de material e ausência dele, i.e., microestruturas bem definidas tanto quanto possível através de “pretos” e “brancos”. Para obter esta definição utiliza-se o modelo SIMP com expoente elevado de modo a penalizar os valores de densidade μ intermédios. Esta modelação pode efectivamente favorecer o aparecimento de xadrez. Para evitar este problema numérico, poder-se-iam utilizar elementos finitos com funções interpoladoras ou polinómios de grau superior (interpolação quadrática em elementos sólidos

de 20 nós), vejam-se resultados bidimensionais em Rodrigues e Fernandes (1993). Contudo, esta solução é dispendiosa em termos de custo computacional. Sendo assim, para obviar o problema do xadrez, aplica-se nesta dissertação uma técnica de filtro conforme tem sido prática corrente em problemas de optimização de topologia (Sigmund 1994; Sigmund e Petersson, 1998). Esta técnica é baseada numa média ponderada dos valores dos gradientes locais:

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial \rho_k} \right\rangle = \frac{1}{\rho_k \sum_{i=1}^N \hat{H}_i} \sum_{i=1}^N \hat{H}_i \rho_i \frac{\partial f}{\partial \rho_i}, \quad (3.1)$$

$$\hat{H}_i = r_{\min} - \text{dist}(k, i), \quad \{i \in \mathbb{N} \mid \text{dist}(k, i) \leq r_{\min}\}, k = 1, \dots, N$$

Aqui os gradientes locais são calculados por (2.101). Os pesos da média ponderada dizem respeito à densidade e distância dos elementos vizinhos (definidos a menos de um raio r_{\min}) relativamente ao elemento actual k .

Acrescente-se que a técnica de filtro (3.1) também é utilizada com o objectivo de obter soluções independentes da resolução da malha de elementos finitos utilizada.

3.2. Estratégias algorítmicas de solução do problema hierárquico

Nesta secção são propostas diferentes estratégias de solução do problema multiescala de distribuição de material. Estas são aqui divididas fundamentalmente em dois tipos:

- (I) estratégias que assumem as densidades relativas microscópicas, μ , como as variáveis de projecto independentes, enquanto as densidades macroscópicas são calculadas implicitamente a partir das densidades micro uma vez que estas sejam conhecidas.
- (II) estratégias que assumem ambas as densidades, macro e micro, como variáveis independentes, cada uma delas na respectiva escala.

3.2.1. Estratégias tipo I

A condição de optimalidade do problema multiescala na forma simplificada da equação (2.70) é semelhante à condição de optimalidade de um problema de optimização de

topologia clássica, i.e., minimização da *compliance* com variáveis de densidade e com um constrangimento de volume global. Observe-se, porém, que na equação (2.70) as densidades têm significado num domínio local e o multiplicador de Lagrange está associado ao constrangimento de volume global. Embora o problema multiescala seja caracterizado pelos campos escalares (densidades), μ e ρ , a equação (2.70), que condensa as condições de optimalidade dos problemas global e local, apenas assume como variável independente a densidade μ . A densidade ρ é dependente de μ através de (2.53). Estas simplificações permitem então resolver o problema multiescala (2.55) e (2.56) assumindo apenas como variáveis independentes as densidades micro, μ . Mesmo assim o algoritmo para o problema multiescala não pode ser confundido com o algoritmo do problema clássico a uma escala pois assume-se a existência de duas escalas através de (2.53) e as propriedades elásticas do material em cada ponto $\mathbf{x} \in \Omega$ (escala macroscópica) são as propriedades homogeneizadas da microestrutura obtida no domínio local Y (escala microscópica).

Nesta secção as estratégias do tipo I apresentadas baseiam-se nos métodos do Critério de Optimalidade (OC¹) e Assíptotas Móveis (MMA²). Estes métodos têm sido muito utilizados em optimização de topologia clássica (ver Bendsøe e Sigmund 2003) e como se mostra em seguida também podem ser aplicados em problemas multiescala.

3.2.1.1. Método do critério de optimalidade

O método do critério de optimalidade é baseado na solução das condições de optimalidade (2.53), (2.64) e (2.70) de fácil implementação numérica usando um método de ponto fixo como um esquema de actualização das variáveis de projecto em cada iteração, neste caso as variáveis de densidade local $\mu_{e'}^{E'}|_t$, $t = 0, \dots, T$ (t é o contador de iterações e “0” corresponde à inicialização). Em termos analíticos, este método é descrito pelas equações (3.2) a (3.5), ver também Coelho *et al.* (2008a). Estas equações reflectem um esquema de solução semelhante ao que acontece no problema clássico de minimização da *compliance* resolvido através do método do critério de optimalidade (Bendsøe e Sigmund 2003).

¹ Abreviatura da denominação *Optimality Criteria methods* na literatura Anglo-Saxónica.

² Abreviatura da denominação *Method of Moving Asymptotes* na literatura Anglo-Saxónica.

$$\mu_{e'}^{E'}|_{t+1} = \begin{cases} \max[(1-\xi)\mu_{e'}^{E'}|_t, \mu_{\min}] & \text{se } \gamma_{e'}^{E'} \mu_{e'}^{E'}|_t \leq \max[(1-\xi)\mu_{e'}^{E'}|_t, \mu_{\min}] \\ \gamma_{e'}^{E'} \mu_{e'}^{E'}|_t & \text{se } \max[(1-\xi)\mu_{e'}^{E'}|_t, \mu_{\min}] < \gamma_{e'}^{E'} \mu_{e'}^{E'}|_t < \min[(1+\xi)\mu_{e'}^{E'}|_t, 1] \\ \min[(1+\xi)\mu_{e'}^{E'}|_t, 1] & \text{se } \gamma_{e'}^{E'} \mu_{e'}^{E'}|_t \geq \min[(1+\xi)\mu_{e'}^{E'}|_t, 1] \end{cases} \quad (3.2)$$

$$\gamma_{e'}^{E'} = \frac{\sum_{r=1}^P \left[\alpha^r \frac{\partial E_{ijkl}^H(\mu)}{\partial \mu_{e'}^{E'}(y)} \langle e_{kl}(\mathbf{u}^r) \rangle_{E'} \langle e_{ij}(\mathbf{u}^r) \rangle_{E'} \right]}{A_t} \quad (3.3)$$

$$A_{t+1} = \max \left[0, A_t + c \left(\int_{\Omega} \rho_t d\Omega - \bar{V} \right) \right] \quad (3.4)$$

$$\rho_{t+1}^{E'} = \int_{Y^{E'}} \mu_{e'}^{E'}|_{t+1} dY^{E'} \quad (3.5)$$

As equações (3.2) e (3.3) obedecem a uma discretização do problema por elementos finitos (EF). Sendo assim, o esquema de actualização (3.2) refere-se ao problema local E resolvido no domínio $Y^{E'}$ e que caracteriza a microestrutura do material celular que se assume existente numa região com a dimensão do elemento finito E da malha global em Ω , $E' = 1, \dots, M$ (M é o número total de EF à escala macroscópica). O índice e representa o elemento finito da malha que discretiza o domínio local $Y^{E'}$, $e = 1, \dots, m$ (m é o número total de EF que discretiza Y). O parâmetro ξ é um limite móvel entre 0 e 1 (por exemplo, 0.25) que é utilizado para manter sob controlo a variação de μ dentro do intervalo $[\mu_{\min}, 1]$. Sem este limite móvel o valor de μ poderia oscilar demasiado originando um comportamento numérico instável do algoritmo. A variável de densidade microscópica tem como valor mínimo de variação μ_{\min} de modo a evitar-se o valor zero que origina singularidades na matriz de rigidez obtida pelo método dos EF. O factor multiplicativo $\gamma_{e'}^{E'}$ em (3.2) é definido através de (3.3) e resulta da equação de optimalidade (2.70). Em (3.3) o operador $\langle \cdot \rangle_{E'}$ refere-se ao valor da extensão média calculada para o elemento E' através da resolução do problema de equilíbrio global (problema de \min na equação (2.55)). O esquema de actualização do multiplicador de Lagrange A em (3.4) provém da equação (2.64) e depende de um parâmetro de penalidade c e do valor inicial A_0 . Verifica-se que a convergência deste método depende muito dos valores escolhidos inicialmente para os parâmetros ξ , c e A_0 . Estes necessitam de uma selecção criteriosa para se obter uma convergência rápida e estável do algoritmo. Isto muitas vezes só é conseguido pela

experiência acumulada após correr o algoritmo várias vezes o que, na verdade, representa uma desvantagem na utilização do método do critério de optimalidade.

A repetição do esquema iterativo apresentado em (3.2) conduz a um processo de optimização com elevado custo computacional. Considera-se aqui que existe um problema local a resolver por cada EF macro E' , ou seja, existem tantos problemas locais para resolver quanto o número de EF macro, M . No entanto, observe-se nas equações (3.2) e (3.3) que a solução da iteração $t+1$ (actualização do campo escalar μ em cada célula) dependente apenas da distribuição de μ na célula respeitante à iteração anterior t e das grandezas macroscópicas $\langle e_{ij} \rangle_{E'}$ e Λ . Isto torna os problemas locais E' ($E'=1, \dots, M$) independentes ou separáveis na obtenção da solução de distribuição de material correspondente à iteração $t+1$. Assim, entre cada duas iterações consecutivas, t e $t+1$, em vez de se resolverem os problemas locais em série, pode-se tirar partido da característica de separabilidade destes problemas e aplicar técnicas de processamento paralelo para resolver conjuntos de problemas locais em diferentes processadores. Deste modo, o tempo de cálculo pode ser consideravelmente reduzido.

O fluxograma da figura 3.2 mostra o funcionamento do algoritmo (principais rotinas) que resolve o problema multiescala recorrendo ao método do critério de optimalidade destacando-se as versões em série e em paralelo. O algoritmo é constituído por dois ciclos principais. Um ciclo externo que corre o problema global e um ciclo interno que percorre os vários problemas locais. Sublinha-se que uma iteração em cada problema local é executada por cada iteração no problema global. Na versão em paralelo o ciclo nos M elementos macro (problemas locais) é dividido por vários processadores.

O algoritmo começa pela rotina INICIAL, i.e., leitura dos modelos de elementos finitos global e local e dos valores iniciais de E^0_{ijkl} , $\mu^0(\mathbf{y})$, ξ , c , Λ_0 . A rotina INICIAL calcula por homogeneização as propriedades elásticas do projecto inicial E^H_{ijkl} e calcula os gradientes $\partial E^H_{ijkl} / \partial \mu$. A rotina GLOBAL executa uma análise de EF (utilizando o ANSYS) para resolver o problema de equilíbrio global, são calculadas as deformações em cada elemento macro, é avaliada a função objectivo global (energia de deformação total) e o multiplicador de Lagrange Λ é actualizado através de (3.4). Depois é realizada uma verificação de convergência do algoritmo. O critério de paragem está associado a uma tolerância de convergência dos valores da função objectivo. O processo é repetido até ser satisfeito o critério de convergência. A rotina OPTCELL realiza a actualização das

densidades micro através de (3.2) e (3.3) e calcula a densidade macroscópica através de (3.5). A rotina HOMOG calcula as novas propriedades homogeneizadas da microestrutura E_{ijkl}^H e os novos gradientes $\partial E_{ijkl}^H / \partial \mu_e$. Em suma, a principal informação que os problemas global e local trocam entre si consiste no estado de deformação \mathbf{e} e no multiplicador Λ (que o problema global fornece ao local) e no tensor homogeneizado \mathbf{E}^H e na nova densidade macro ρ (que o problema local fornece ao global).

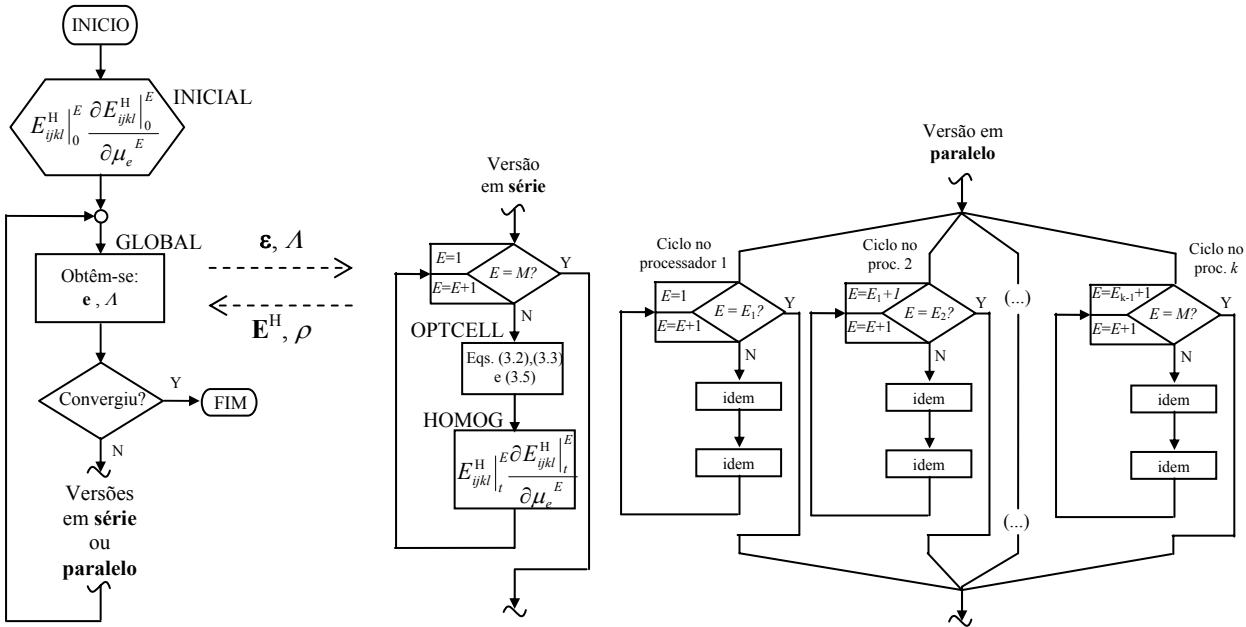


Figura 3.2. Fluxograma do algoritmo que utiliza o método do critério de optimalidade.

Versões do algoritmo em série e paralelo. Fluxo principal de informação entre problemas global e local indicado pelo tracejado.

3.2.1.2. Método das assíntotas móveis

Em problemas de otimização de topologia, especialmente de dimensão elevada, o Método das Assíntotas Móveis (MMA) é particularmente adequado devido às suas características de convexidade e separabilidade (Svanberg, 1987; Bendsøe e Sigmund, 2003). A estratégia apresentada em seguida substitui o método do critério de optimalidade por um método de programação matemática, neste caso o MMA.

Conforme já explicado, sem perda do significado de otimização hierárquica, as equações (3.2) e (3.5) permitem encarar o problema multiescala de uma forma simplificada como um problema de minimização da energia de deformação global nas variáveis de projecto que são as densidades locais e sujeito a um constrangimento de

volume global. Nesta linha de raciocínio, o problema apresentado em (2.50) a (2.54) ou (2.55) e (2.56) pode ser agora reformulado convenientemente para:

$$\min_{\substack{\mu(\mathbf{x},\mathbf{y}) \\ \mu_{\min} \leq \mu(\mathbf{x},\mathbf{y}) \leq 1 \\ \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}) d\Omega \leq V^* \text{ em que } \rho(\mathbf{x}) = \int_Y \mu(\mathbf{x},\mathbf{y}) dY}} F(\mu) \quad \text{com } F(\mu) = \int_{\Omega} \sum_{r=1}^P \alpha^r [E_{ijkl}^H(\mu) e_{ij}(\mathbf{u}^r) e_{kl}(\mathbf{u}^r)] d\Omega \quad (3.6)$$

onde,

$$\mathbf{u}^r \text{ é solução de } \int_{\Omega} E_{ijkl}^H(\mu) e_{ij}(\mathbf{u}^r) e_{kl}(\mathbf{v}^r) d\Omega = \int_{\Omega} b_i^r v_i^r d\Omega + \int_{\Gamma_i^r} t_i^r v_i^r d\Gamma, \quad \forall \mathbf{v}^r \text{ admissível} \quad (3.7)$$

O problema (3.6) apresenta uma forma adequada para ser resolvido por um método de programação matemática. O problema minimiza a função objectivo $F(\mu)$ considerando como variáveis de projecto as densidades μ . O campo de deslocamentos \mathbf{u} é solução da equação de equilíbrio aqui apresentada na forma do princípio dos trabalhos virtuais (3.7) e que é resolvida através da chamada a uma rotina ou código de elementos finitos (por exemplo, ANSYS). A hierarquia do problema está subjacente na descrição de μ através das variáveis de posição espaciais \mathbf{x} e \mathbf{y} com significado nas escalas macro e micro, respectivamente. Considera-se um constrangimento de volume global (em Ω) que assume implicitamente satisfeito o constrangimento de volume local dado por (2.53).

O MMA constrói um subproblema de (3.6) com base na informação dos valores das funções objectivo e dos constrangimentos e dos respectivos gradientes avaliados num ponto do espaço de projecto. A sucessão de subproblemas que o MMA gera e resolve para uma sucessão de pontos no espaço de projecto deve convergir para a solução do problema original. O gradiente da função objectivo é o numerador da equação (3.3) afectado do sinal negativo e o gradiente da função do constrangimento g é uma constante visto que o volume é linear nas variáveis de projecto. Portanto, neste caso todos os gradientes necessários são possíveis de se calcular analiticamente.

O problema (3.6) é resolvido através de uma discretização por EF dos domínios Ω (M elementos) e Y (m elementos). Logo, as variáveis de projecto $\mu(\mathbf{x},\mathbf{y})$ podem ser representadas por um vector de dimensão $M \times m$, i.e., $\{\mu_1^1, \dots, \mu_e^1, \mu_1^2, \dots, \mu_e^2, \mu_1^E, \dots, \mu_e^E\}$ com $e=1, \dots, m$ e $E=1, \dots, M$. É necessário ressaltar que este problema é diferente do problema clássico de topologia que discretiza um domínio em $M \times m$ elementos para trabalhar com igual número de variáveis de densidade. No problema multiescala a quantidade μ_e^E

representa a densidade no elemento e local (Y^e) pertencente ao elemento E global (Ω^E). Considera-se que $\mu_e^E = \text{constante}$ em $\mathbf{y} \in Y^e$ e que $\rho = \text{constante}$ em $\mathbf{x} \in \Omega^E$. A distribuição de material entre as duas escalas está relacionada através de (2.53), ou seja, num ponto $\hat{\mathbf{x}} \in \Omega$ a densidade macroscópica $\rho(\hat{\mathbf{x}})$ é calculada a partir da distribuição de $\mu(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{y})$ em Y . As propriedades elásticas do material nesse ponto $\hat{\mathbf{x}}$ são solução do problema de homogeneização resolvido no domínio Y .

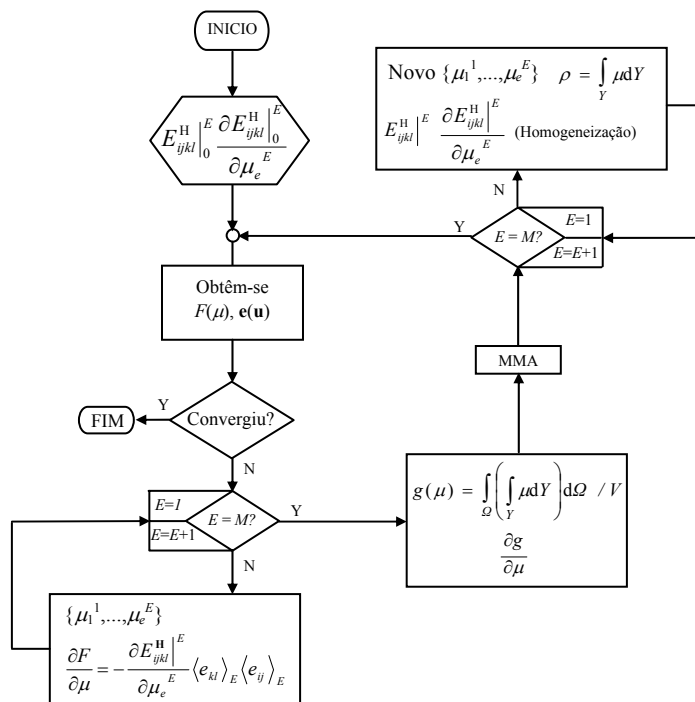


Figura 3.3. Fluxograma do algoritmo que utiliza o MMA (versão em série).

O fluxograma da figura 3.3 mostra o funcionamento do algoritmo utilizando o MMA. Comparando a figura 3.3 com a figura 3.2, o otimizador MMA não figura no ciclo dos elementos macro porque otimiza com todas as variáveis μ , i.e., μ_e^E ($e=1, \dots, m$ e $E=1, \dots, M$). Neste caso, não existe a característica de independência dos problemas locais na atualização de μ como era possível de realizar com o OC através de (3.2). Este aspecto é desfavorável à paralelização do algoritmo, pelo que, apenas se encara neste trabalho a versão em série. A versão em série torna desinteressante a aplicação desta estratégia porque o tempo de computação se torna proibitivo ou os requisitos de memória do computador são excedidos. Esta estratégia apresenta-se nesta dissertação, não pela sua eficiência computacional, mas para avaliar a qualidade das soluções obtidas por comparação com outras estratégias. Adicionalmente, este algoritmo constitui um teste à

capacidade do MMA para resolver problemas de grande dimensão, i.e., com alguns milhões de variáveis de projecto conforme mostrado nos exemplos do capítulo 4.

3.2.2. Estratégias tipo II

Este tipo de estratégias de solução ajusta-se naturalmente à descrição do problema de optimização através da formulação hierárquica apresentada em (2.55) e (2.56) ou (2.83) e (2.84). A vantagem desta formulação e estratégias de solução associadas é tornar mais fácil o tratamento de constrangimentos de projecto adicionais ao nível da microestrutura. De facto, o método do critério de optimalidade deixa de ser atractivo em problemas com mais do que um constrangimento devido à maior complexidade das condições de óptimo e parâmetros de convergência requerendo afinação.

As estratégias tipo II colocam um algoritmo de optimização a resolver cada problema, (2.83) e (2.84). O optimizador utilizado em (2.83) tem como variáveis de projecto independentes as densidades macroscópicas, ρ , enquanto que para o optimizador de (2.84) as variáveis são as densidades microscópicas, μ . Várias combinações de optimizadores podem ser estudadas. Contudo, nesta dissertação estudam-se duas: MMA/OC e MMA/CONLIN. A primeira combina o MMA para resolver (2.83) com o método do critério de optimalidade (OC) para resolver (2.84). A segunda é semelhante à primeira exceptuando o optimizador local que é substituído pelo CONLIN (CONvex LINearization scheme, utilizado aqui como um caso particular do MMA).

Visto que (2.83) é resolvido pelo MMA e este algoritmo aplica-se à minimização de funções, reescreve-se (2.83) agora como (3.8). A sensibilidade de F em (3.8) é requerida pelo MMA e é calculada utilizando o resultado de (2.100), agora afectado do sinal negativo. É necessário fornecer o mesmo tipo de informação sobre o constrangimento de volume, que é fácil de calcular pois o volume é linear em ρ .

$$\min_{\substack{\rho(\mathbf{x}) \\ 0 < \rho(\mathbf{x}) \leq 1 \\ \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}) d\Omega \leq V^*}} F(\rho) \quad \text{com } F(\rho) = \int_{\Omega} \Phi(\rho, \mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^P) d\Omega \quad (3.8)$$

De acordo com a formulação (2.83) e (2.84), os valores das variáveis de projecto baseadas na densidade podem encostar aos limites inferior ou superior, contudo, isto deve ser evitado em alguns casos particulares considerados em seguida. Primeiro, o limite inferior, μ_{\min} ou

ρ_{\min} , é fixo num valor suficientemente pequeno (próximo de 0) para evitar singularidades nas matrizes de rigidez. Além disso, note-se que as soluções locais tendem a alcançar os valores extremos de variação da densidade em resultado da interpolação pelo método SIMP que penaliza as densidades intermédias (pretendem-se soluções “preto-branco”, ver secção 2.1). Se todas as densidades locais, μ 's, encostam aos extremos (μ_{\min} ou 1) não existe definido o multiplicador de Lagrange λ_i relacionado com o constrangimento local g_i . Consequentemente, também não existe definida a derivada da função F dada por (2.100). Para facilmente ultrapassar estas dificuldades, a técnica de filtro das sensibilidades (3.1) que é aplicada para evitar o problema do xadrez (secção 3.1) é também um modo de garantir um certo nível de “cinzento” ($0 < \mu < 1$) nas soluções locais, prevenindo assim que todas as variáveis de projecto locais igualem os valores extremos. Mesmo assim, no problema global, a variável ρ poderia tomar os limites inferior ou superior ($\rho_{\min} = \mu_{\min}$ ou $\rho_{\max} = 1$) o que obrigaria através de (2.53) a que todos os μ 's fossem iguais a μ_{\min} ou 1, respectivamente. Para evitar que isto suceda podem considerar-se limites de variação para ρ ligeiramente modificados, $\rho_{\min} + \zeta$ e $\rho_{\max} - \zeta$ (onde ζ é um número positivo pequeno), tal que $[\rho_{\min} + \zeta, \rho_{\max} - \zeta] \subset]\mu_{\min}, 1[$. Deste modo, fica garantida a existência de multiplicadores de Lagrange λ e, consequentemente, a diferenciabilidade da função F em relação a ρ .

O controlo da variação das variáveis de projecto globais e locais é crucial para a convergência do algoritmo. Uma boa prática de convergência consiste em relaxar a variação das densidades locais e apertar o intervalo de variação das densidades globais. Para resolver o problema local, isto significa colocar o limite móvel $\zeta = 1$ no OC ou os limites móveis $\alpha = 0$ e $\beta = \infty$ no MMA, ou seja, obtém-se o CONLIN (ver Svanberg 1987). No caso da variação das densidades globais pequenas variações são requeridas entre cada duas iterações consecutivas. Isto significa que os limites móveis do MMA, α e β , são colocados próximos do ponto de projecto actual (ALBEFA = 0.9 ou 0.95, parâmetro definido na versão do MMA em FORTRAN, ver Svanberg, 1987).

Em seguida, são explicadas com mais detalhe as estratégias MMA/OC e MMA/CONLIN sendo que a segunda se reveste de uma maior importância nesta dissertação por apresentar um maior potencial de aplicações.

3.2.2.1. MMA/OC

Neste tipo de estratégia o método do critério de optimalidade é utilizado para resolver o problema local e baseia-se no mesmo esquema iterativo de actualização das variáveis locais de densidade apresentado em (3.2), mas agora o denominador em (3.3) é λ em vez de Λ . Este multiplicador de Lagrange local λ deve ser calculado num ciclo interno do algoritmo de modo a satisfazer o constrangimento de volume local activo (2.53). Neste caso, à semelhança daquilo que também foi realizado por Sigmund (2001), utiliza-se um algoritmo de bissecção para determinar o valor de λ que é único pois no intervalo de interesse das densidades a variação do volume é estritamente monótona.

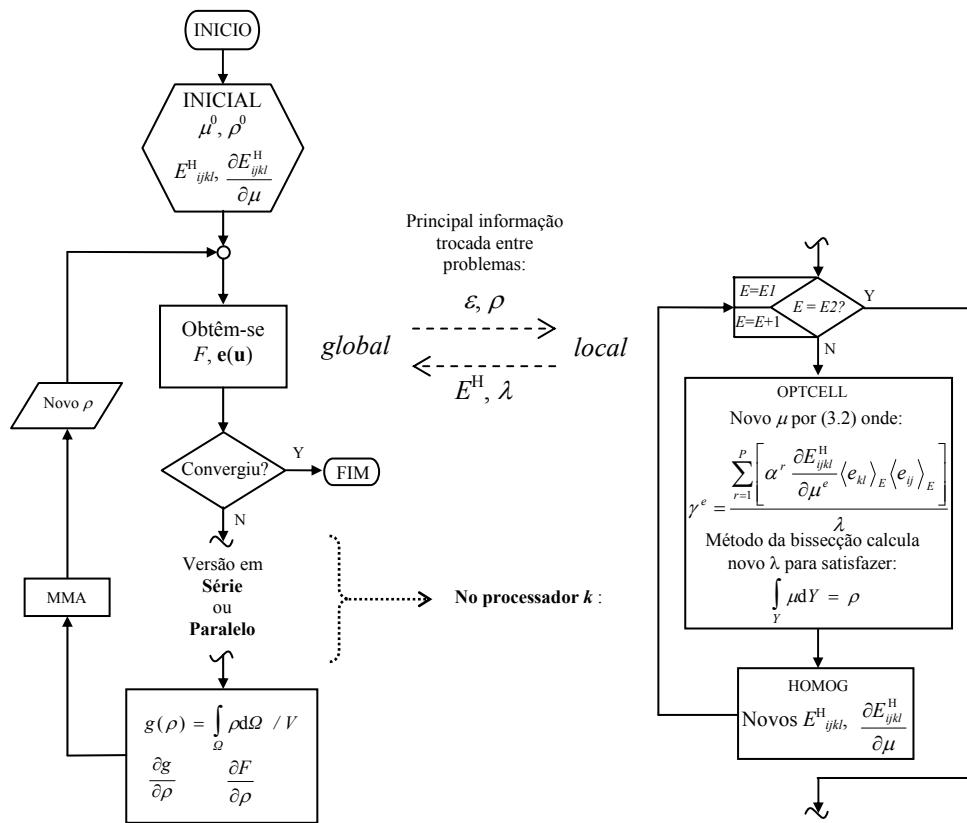


Figura 3.4. Fluxograma do algoritmo que utiliza o MMA/OC.

O fluxograma da figura 3.4 ilustra o funcionamento do algoritmo desta estratégia do tipo II. Mais uma vez é destacada a propriedade de separabilidade dos problemas locais que podem então ser resolvidos simultaneamente em diferentes processadores. A técnica de paralelização utilizada aqui tem características semelhantes ao que foi apresentado na secção 3.2.1.1. Entre cada duas iterações consecutivas no problema global, os problemas locais são distribuídos por vários processadores para acelerar a obtenção das soluções locais. As setas a

tracado na figura 3.4 representam o principal fluxo de informao entre os problemas global e local.  igno de nota que, ao contrrio das estratgias tipo I, agora as densidades macroscpicas ρ so consideradas variveis de projecto independentes e fixam a fraco vl mica para cada problema de distribuo de material no domnio da clula Y . O valor de ρ  actualizado pelo MMA em cada iterao do problema global.

3.2.2.2. MMA/CONLIN

Esta estratégia é similar à anterior excepto que substitui o método do critério de optimalidade OC pelo CONLIN para resolver o problema local, veja-se o fluxograma da figura 3.5 e compare-se com o da figura 3.4.

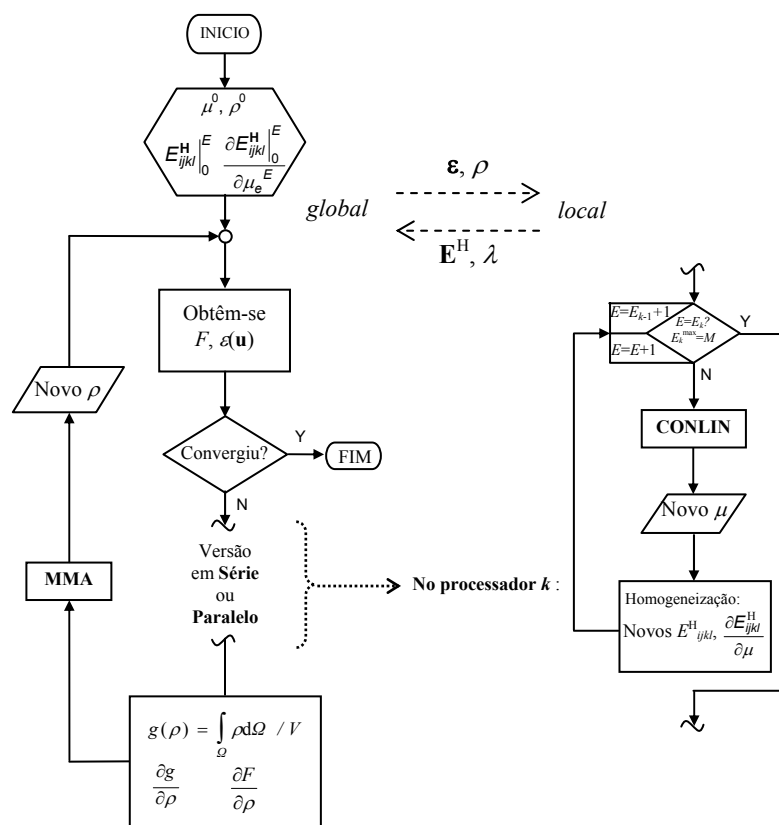


Figura 3.5. Fluxograma do algoritmo que utiliza o MMA/CONLIN.

Esta estratégia tem um maior potencial de aplicações visto que o CONLIN permite resolver problemas de optimização constrangidos com um maior número de constrangimentos comparativamente ao OC. Salienta-se que em optimização concorrente da estrutura e do material, é desejável impor constrangimentos no projecto das microestruturas do material seja devido a razões de fabrico ou de funcionalidade. Portanto, de entre todas as estratégias algorítmicas abordadas nesta dissertação, esta parece ser a mais promissora.

A razão de não ter sido utilizado o MMA no lugar do CONLIN reside no facto do CONLIN, ao contrário do MMA, ter provado dar os multiplicadores de Lagrange locais (λ 's) correctos. Esta informação é importante para satisfazer as condições de optimalidade (2.100) e assim conseguir-se convergência do algoritmo. Além do mais, o CONLIN é eficiente na solução do problema local pois enquanto, por um lado, aproxima a função da densidade de energia de deformação local por uma aproximação convexa, por outro lado, a aproximação é exacta para o caso do constrangimento de volume local pois este é linear. A versão do CONLIN utilizada nesta dissertação é um caso particular do MMA de Svanberg (1987), ou seja, a assíntota vertical inferior é fixa em zero e a superior é colocada teoricamente no infinito (na prática é lhe atribuído um valor suficientemente grande).

3.3. Processamento paralelo

Na secção anterior considerou-se que a propriedade de separabilidade dos problemas locais na obtenção de uma solução entre cada duas iterações consecutivas no problema global, torna apelativo o uso de técnicas de processamento paralelo. Os fluxogramas apresentados anteriormente já mostraram a implementação em paralelo dos respectivos algoritmos. Nesta secção pretende-se, em primeiro lugar, dar uma visão geral dos trabalhos que têm utilizado processamento paralelo em optimização de topologia (secção 3.3.1). A secção 3.3.2 procura dar uma visão geral de alguns problemas da actualidade considerados grandes desafios na área da computação. Depois, apresenta-se na secção 3.3.3 de forma mais detalhada a implementação em paralelo da estratégia algorítmica MMA/CONLIN. Esta é a estratégia considerada mais importante no âmbito desta dissertação. A implementação das outras estratégias em paralelo (excepto MMA – estratégia tipo I) segue um procedimento semelhante ao explicado para a estratégia MMA/CONLIN. Para avaliar a escalabilidade de um problema, são apresentadas na secção 3.3.4 indicadores de desempenho. Finalmente, a secção 3.3.5 apresenta uma breve descrição das máquinas (*clusters*) de computação paralela utilizadas para a obtenção dos resultados apresentados nos capítulos 4 e 6 desta dissertação.

3.3.1. Computação paralela em otimização de topologia

A otimização de topologia de estruturas tem sido amplamente utilizada no meio académico. Também tem sido aplicada a problemas da vida real na indústria, especialmente nas indústrias automóvel e aeronáutica onde tem sido sobretudo utilizada como ferramenta de apoio à fase de projecto conceptual (Thomas *et al.*, 2002, Chiandussi *et al.*, 2004). No entanto, o uso industrial da otimização de topologia só não tem sido ainda mais alargado devido ao custo computacional envolvido em algumas aplicações de engenharia envolvendo modelos de grande dimensão. Neste contexto, surge a computação paralela em otimização de topologia como meio de tornar apetecível a sua utilização em problemas mais complexos.

Tipicamente em otimização de topologia o domínio de projecto é discretizado por uma malha de elementos finitos e o objectivo do problema de distribuição de material é definir a densidade relativa em cada um desses elementos. Em geral, obtém-se um elevado número de variáveis de projecto (densidades) assente num modelo de elementos finitos refinado para garantir precisão na solução final. Sendo assim, a otimização de topologia exige a solução de numerosos sistemas de equações de dimensão elevada com as consequentes dificuldades computacionais. De facto, vários autores associam este aspecto ao principal *bottleneck*¹ em otimização de topologia (*e.g.* Wang *et al.*, 2007).

Ao longo dos anos, desde que a otimização de topologia ganhou reavivado interesse com o trabalho de Bendsøe e Kikuchi (1988), muito esforço de investigação tem sido aplicado para desenvolver novas formulações, esquemas de interpolação, estudo da existência e unicidade das soluções, eliminação de instabilidades numéricas (*e.g.*, *checkerboard*), etc. Este esforço tem contribuído para a maturidade da otimização de topologia. No entanto, os aspectos computacionais, como o excesso de memória e o tempo de computação proibitivo associados aos problemas de grande dimensão (grande número de graus de liberdade²), só muito recentemente, durante esta década, têm sido examinados (Borrvall e Petersson, 2001; Kim *et al.*, 2004; Vemaganti e Lawrence, 2005; Mahdavi *et al.*, 2006; Wang *et al.*, 2007; Evgrafov *et al.*, 2008; Rajan *et al.*, 2008). Nestes trabalhos, duas abordagens são destacadas conforme resumido em seguida. Uma consiste em reduzir o número de operações de vírgula flutuante

¹ Termo anglo-saxónico que faz parte do jargão da computação de elevada performance (HPC – *High Performance Computing*). Traduzido para português significa gargalo ou pescoço da garrafa transmitindo assim a ideia de que existem partes do algoritmo de maior congestionamento de informação ou computação.

² Tipicamente problemas com modelação por elementos finitos tridimensionais ou então com vários milhares de elementos planos.

por segundo (FLOP's¹) necessárias para resolver o problema de optimização de topologia, *e.g.*, uso de métodos mais rápidos de solução (*solvers*) de sistemas de equações como os métodos iterativos (*e.g.*, PCG – *Preconditioned Conjugate Gradient method*) em vez de métodos directos (*e.g.*, eliminação de Gauss). Outra abordagem consiste em aumentar a capacidade de cálculo através de computação paralela.

A técnica de decomposição do domínio (Rixen e Magoulès, 2007) combinada com a computação paralela (figura 3.6) tem sido utilizada para resolver sistemas lineares de equações $\mathbf{Ku} = \mathbf{f}$, dados pelo método dos elementos finitos. A ideia básica desta técnica é decompor o domínio de projecto Ω em D' subdomínios Ω_i ($i=1, \dots, D'$) e deixar que cada processador de uma máquina paralela seja responsável pelos cálculos e armazenamento de dados em memória no seu subdomínio Ω_i . Aplicando esta técnica, o sistema de equações $\mathbf{Ku} = \mathbf{f}$ é reescrito na forma:

$$\left(\sum_{j=1}^{D'} \mathbf{K}_j \right) \mathbf{u} = \left(\sum_{j=1}^{D'} \mathbf{f}_j \right) \quad (3.9)$$

Onde \mathbf{K}_j e \mathbf{f}_j são as contribuições do subdomínio j (alocado ao processador j) para a matriz de rigidez e vector de carga globais, respectivamente. O método dos gradientes conjugados tem sido considerado o método mais eficiente para resolver sistemas de equações de grande dimensão, esparsos, simétricos, positivos definidos e mal condicionados (típico de optimização de topologia) e também é um método de fácil implementação em paralelo.

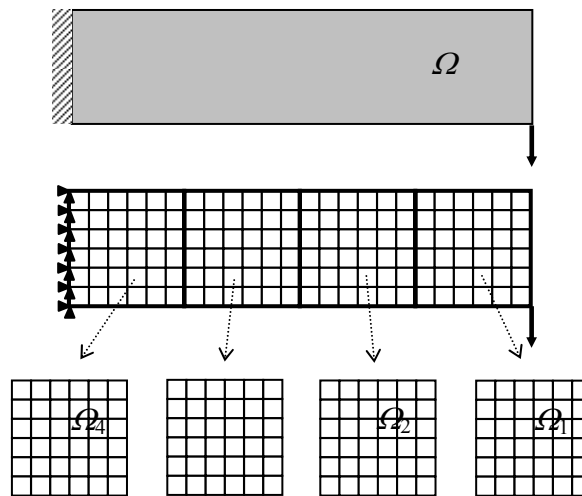


Figure 3.6. Técnica de decomposição do domínio ilustrada com uma malha de elementos finitos 24x6 para o domínio de projecto de uma viga em consola.

¹ Abreviatura de **F**loating point **O**perations **P**er **S**econd.

A descrição feita aqui dos desafios computacionais que se apresentam em problemas de otimização de topologia de grande dimensão tem justificado o uso de computação paralela. Sublinhe-se agora que ainda mais desafiador, em termos de custo computacional, é a otimização simultânea da estrutura e do material conforme objecto desta dissertação (Coelho *et al.* 2008a). Neste caso, para além de uma sequência de análises de EF correspondentes ao problema global, por cada iteração global existe uma sequência de problemas locais caracterizando a microestrutura do material.

3.3.2. Problemas que constituem grandes desafios

Nos últimos anos o potencial dos recursos computacionais disponíveis tem vindo a crescer juntamente com o apetite pela solução numérica de problemas da vida real cada vez mais complexos. Alguns destes problemas são considerados grandes desafios¹. Isto significa que são problemas fundamentais em ciência ou engenharia cuja solução poderá ser antecipada (acelerada) pela aplicação de equipamentos e técnicas de computação de elevada performance (Kumar *et al.*, 1994).

A lista dos problemas classificados de grande desafio poderá nunca estar completa visto que cada área da ciência e engenharia potencialmente coloca sempre novos grandes desafios. No entanto, entre estes problemas hoje em dia podem ser listados os seguintes: simulação da dinâmica molecular, dinâmica dos fluidos computacional, modelação de colisão de veículos, previsão meteorológica de alta resolução, estudos de poluição do ar, análise de estruturas de proteínas, análise do comportamento mecânico do osso trabecular e sua adaptação dinâmica (Kumar *et al.*, 1994; DTU/PhD-course, 2008). Este último problema, também chamado de “problema do osso” (DTU/PhD-course, 2008), é abordado nesta dissertação nos capítulos 5 e 6.

Tem sido observado que a estrutura do osso é de algum modo projectada de forma óptima para o ambiente mecânico envolvente. Algumas questões relacionadas com este tema que têm sido levantadas são: Para que objectivo físico são os ossos estruturas optimizadas? Como é que a adaptação do tecido ósseo resulta na optimalidade da sua arquitectura interna? Alguns trabalhos de investigação na área da biomecânica do tecido ósseo têm procurado respostas a estas questões através de modelos de elementos finitos de grande resolução do tecido ósseo

¹ O jargão anglo-saxónico utilizado no contexto da computação de elevado desempenho é *grand challenge problems*.

trabecular. Um método usualmente aplicado é utilizar uma amostra de osso trabecular para fazer um varrimento através de uma micro-tomografia computadorizada (μ -CT¹). A imagem obtida em computador de elevada resolução (milhões de *Voxels*) é então convertida para uma malha de micro-elementos finitos, μ -EF, tipicamente com dezenas de milhões de EF. Isto implica matrizes de rigidez enormes no modelo EF que são proibitivas do ponto de vista da obtenção de uma solução numérica convencional. Para obviar este problema tem sido aplicado o método EBE-PCG² na versão paralela para a resolução do sistema de equações lineares resultante. Este método não requer que a matriz de rigidez global seja toda armazenada em memória do computador aquando da resolução do sistema de equações. Isto reduz grandemente os requisitos de memória e tempo de computação. Além disso, este método é facilmente paralelizado. Utilizando esta técnica, têm sido realizadas análises de μ -EF (Adams *et al.*, 2003; 2004; Rietbergen *et al.*, 2003; Arbenz *et al.*, 2008) para obter os valores de deformação local em modelos de EF que representam o osso à escala de uma trabécula, de uma amostra de osso trabecular ou do osso inteiro.

Por exemplo, uma análise linear elástica com μ -EF foi realizada para um fémur proximal discretizado com 96.8 milhões de EF e 130 milhões de nós usando EBE-PCG em paralelo (Rietbergen *et al.*, 2003). Neste trabalho foram utilizados 30 processadores de um computador SG/Cray Origin2000, com um total de 128 processadores e 57 GB de memória. Os requisitos de memória para este problema foram 17GB. Foram necessárias 30000 iterações para obter convergência dos resultados. O total de tempo de CPU foi de 25000h e o tempo total de cálculo (medido em relógio de parede) foi de 6 semanas. Este exemplo é ilustrativo de como este tipo de problemas alimentam a necessidade de mais escalabilidade dos *solvers* utilizados e mais poder de cálculo. Mesmo assim, é bom sublinhar que apenas há poucos anos atrás este modelo de EF para o fémur proximal, que calcula tensões e deformações microscópicas, não parecia mais do que uma utopia!

O problema de análise do tecido ósseo que acabou de ser descrito, envolve a solução de um sistema de equações lineares de dimensão muito elevada, i.e., uma análise de EF. Contudo, à medida que o osso se remodela a sua estrutura altera-se, o que significa que numa simulação computacional de remodelação óssea a análise de EF deve ser repetida várias vezes. Sendo

¹ Abreviatura da denominação *micro-Computed Tomography* na literatura Anglo-Saxónica.

² Abreviatura da denominação *Element By Element Preconditioned Conjugate Gradient method* na literatura Anglo-Saxónica.

assim, pode-se sem dúvida afirmar que a simulação da remodelação óssea é ainda um grande desafio na actualidade.

Em vez de converter *voxels* de uma imagem obtida por μ -CT em μ -EF, existem outras abordagens que podem desempenhar um papel importante no sentido de dar respostas a como o osso se adapta naturalmente ao ambiente mecânico envolvente. O modelo de optimização de topologia a duas escalas, objecto desta dissertação, tem sido utilizado como um modelo tridimensional para simulação da remodelação óssea levando em conta a estrutura hierárquica do osso (Coelho *et al.*, 2007d, 2008b, 2009b). Os capítulos 5 e 6 desta dissertação entrarão em maior profundidade neste assunto.

3.3.3. Algoritmo de optimização hierárquica paralelo

O modelo multiescala (veja-se figura 2.1 e equações 2.83 e 2.84) implica a solução iterativa de um problema à escala macroscópica e muitos problemas a uma escala microscópica caracterizando a microestrutura do material. Na aplicação da estratégia MMA/CONLIN (secção 3.2.2.2), basicamente o problema global é identificado com a solução do problema de equilíbrio (2.51) e actualização das variáveis de densidade macroscópicas através do MMA enquanto, o problema local, envolve a solução do problema de equilíbrio local (2.23) e a actualização das densidades microscópicas através do CONLIN. Visto que os problemas locais de optimização podem ser resolvidos de modo independente entre cada duas iterações do problema global, conjuntos de problemas locais podem ser resolvidos em paralelo recorrendo a uma máquina paralela (de multi-processador). Levando em conta que existem tantos problemas locais a resolver quanto o número de elementos finitos globais, a figura 3.7 ilustra a aplicação da técnica de processamento paralelo utilizada nesta dissertação. Aqui, considera-se um domínio de projecto macroscópico discretizado por 576 EF (total de problemas locais) que são distribuídos por 7 processadores. Visto que o resultado da divisão do número total de problemas locais pelo número de processadores não dá um número inteiro (82.286), cada processador resolve 82 problemas locais exceptuando dois deles que recebem mais um problema extra (83 cada um). Assim se procura distribuir a carga de cálculo por vários processadores de forma mais uniforme, em vez de estar a sobrecarregar apenas um processador.

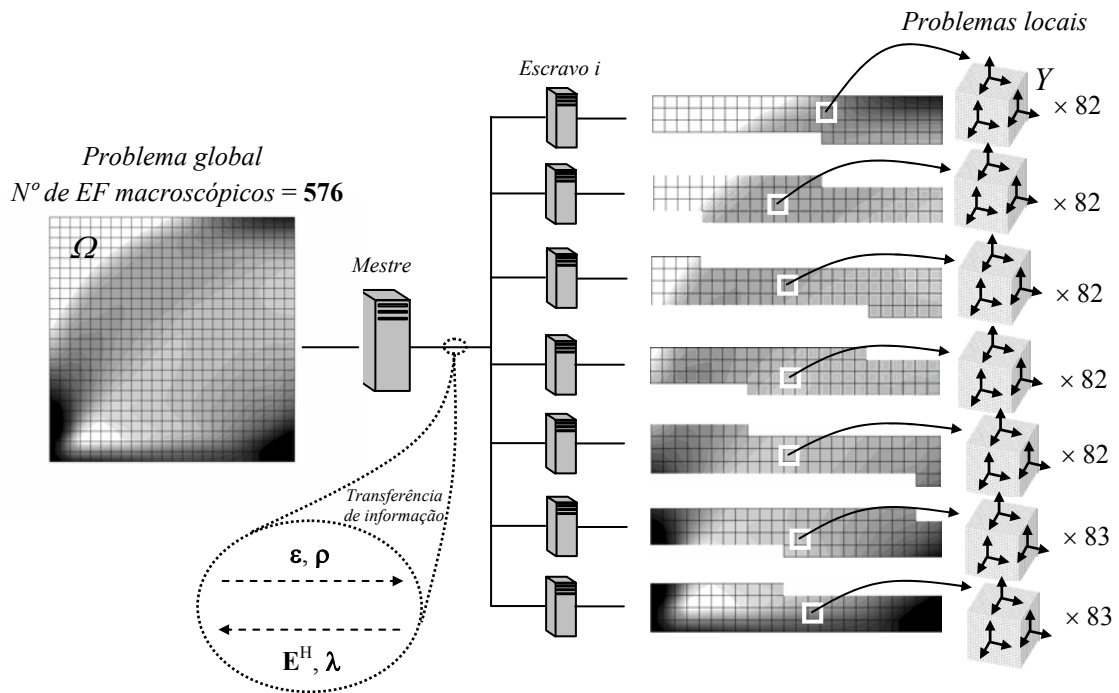


Figure 3.7. Técnica de processamento paralelo usada para obter a solução dos problemas locais.

Ilustração com o exemplo da viga em Arco de Ponte.

A implementação da estratégia algorítmica MMA/CONLIN foi realizada utilizando FORTRAN como linguagem de programação e LAM/MPI que é uma implementação *open-source* da especificação MPI (*Message Passage Interface*). MPI é uma biblioteca para as linguagens C ou FORTRAN que permite escrever programas que são executados em paralelo e que enviam e recebem informação entre eles através da rede. O fluxograma da figura 3.8 corresponde a um único código fonte escrito em FORTRAN que é executado simultaneamente no processador que controla a execução do algoritmo (mestre ou *master*) e no processador ou nó j (escravo ou *slave*), onde $j = 2, \dots, NP$ (número total de processadores utilizados). Utilizando funções do MPI é possível durante o tempo de execução do programa identificar uma porção do código com o processador que executa essa parte. Conforme mostrado neste fluxograma, existe uma parte do código fonte que é executado por todos os processadores. Esta diz respeito à parte da inicialização e chamadas às funções enviar e receber do MPI para permitir comunicação entre processadores. A parte do código que é executada pelo *master* (parte esquerda do fluxograma) comunica com a parte do código que corre em paralelo no nó j (parte direita do fluxograma) através das funções *MPI_send* e *MPI_receive*.

Proceda-se agora a uma descrição mais detalhada do fluxograma da figura 3.8. No início do algoritmo, o *master* calcula o número de problema locais a resolver pelo nó j e envia essa informação para esse nó através de MPI (*Controlo* no fluxograma). Depois disso, ambos *master* e escravo j iniciam um ciclo até o critério de convergência estar satisfeito. A rotina FEA (*Finite Element Analysis*) resolve o problema de equilíbrio global para calcular o campo de deslocamentos \mathbf{u} (o software ANSYS é utilizado para este efeito). Em seguida, uma verificação de convergência é realizada. Se se pretender parar a execução do programa nos diversos processadores, é necessário enviar o resultado da verificação de convergência para todos os nós do *cluster*. Se o critério de convergência não é satisfeito, então o *master* envia para o nó j os valores apropriados de deformação e_{ij} e densidades macroscópicas ρ 's. O algoritmo procede com a solução dos $N_{node\ j}$ problemas locais. Observe-se aqui que a paralelização significa a divisão em partes do ciclo interno nos problemas locais pelos vários processadores. Todos os nós (incluindo o *master*) resolvem o respectivo conjunto de problemas locais, que envolve basicamente a actualização das densidades μ 's através do CONLIN seguida de homogeneização (HOMOG) para determinar as propriedades elásticas equivalentes da nova microestrutura. Para realizar a homogeneização é utilizado um código de elementos finitos em FORTRAN adaptado ao cálculo dos deslocamentos χ 's das equações de equilíbrio locais (2.23). Aqui seis análises de elementos finitos relacionadas com os seis casos de carga diferentes são efectuadas (ver secção 2.2.1). Visto que os elementos finitos locais são todos iguais e as densidades microscópicas constantes em cada um deles, torna-se apenas necessário calcular uma vez a matriz de rigidez dos elementos e multiplicá-la em seguida pelo respectivo valor da densidade cada vez que o método EBE-PCG precisa de fazer a montagem elemento-a-elemento de partes da matriz de rigidez global. Depois da rotina HOMOG, cada nó envia o resultado correspondente para o *master*, que reúne toda a informação acumulada (propriedades elásticas E^H_{ijkl} e multiplicadores de Lagrange λ 's) necessária à actualização das densidades ρ 's pelo MMA e nova solução do problema global (FEA). É digno de nota que o sincronismo entre todos os processadores é conseguido aquando das chamadas às funções *MPI_send* and *MPI_receive* durante a execução do programa.

Resumindo, a solução do problema paralelo requer poucas comunicações entre processadores enquanto uma grande quantidade de cálculo pode ser realizada em paralelo (*coarse-grain problem*). A principal transferência de informação entre processadores está

destacada a tracejado na figura 3.7. O critério de paragem do algoritmo de optimização está relacionado com a estacionaridade da energia de deformação global.

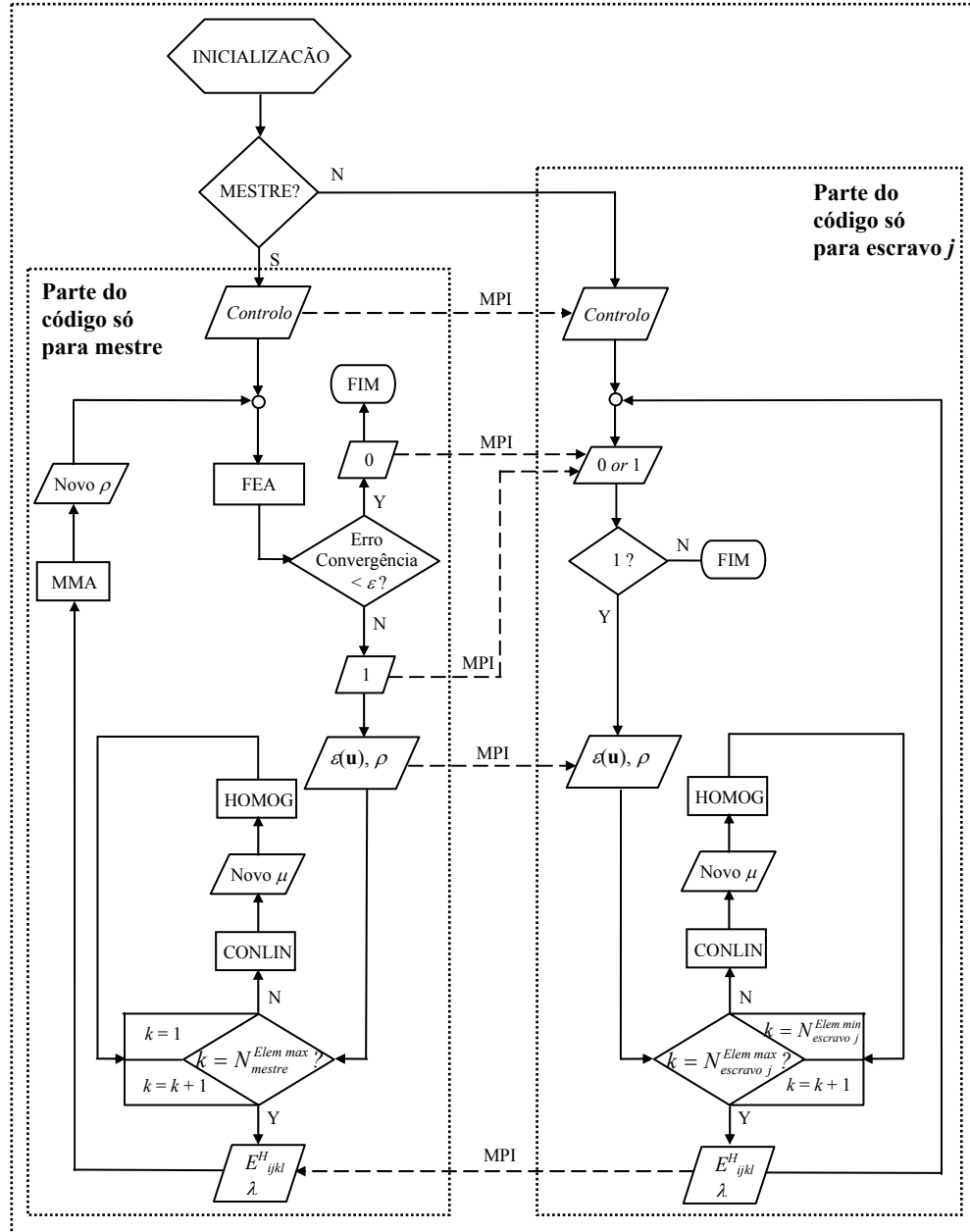


Figure 3.8. Fluxograma mostrando o funcionamento da estratégia algorítmica MMA/CONLIN na versão em paralelo.

3.3.4. Análise de desempenho em cálculo paralelo

Os dois principais indicadores do desempenho de cálculo paralelo considerados aqui são: aceleração (*speed-up*) e eficiência (*efficiency*). Sejam NP o número de processadores utilizados no cálculo paralelo, T_s o tempo de execução do algoritmo na versão em série, T_n o tempo de execução do algoritmo na versão paralela utilizando NP processadores. A

aceleração S_{NP} e eficiência E_{NP} definem-se por (3.10) e (3.11), respectivamente (Grama *et al.*, 2003).

$$S_{NP} = \frac{T_s}{T_n} \quad (3.10)$$

$$E_{NP} = \frac{T_s}{NP \times T_n} \quad (3.11)$$

A aceleração é um indicador de quão mais rápido é um algoritmo paralelo comparativamente ao correspondente algoritmo na versão em série. A eficiência é um indicador de desempenho que pode também ser definido como S_{NP}/NP . Este é um valor entre 0 e 1 (ou 0% e 100%) que estima quão bem utilizados estão a ser os processadores envolvidos na solução do problema ou, de outro ponto de vista, estima quanto esforço é perdido em comunicações e sincronização na solução do problema em paralelo.

Aceleração ideal é obtida quando $S_{NP} = NP$. Quando se executa um algoritmo com aceleração linear, ao dobrar o número de processadores dobra a velocidade, isto é usualmente considerado escalabilidade ideal. Algoritmos com aceleração linear e algoritmos executados em um único processador têm eficiência igual a 1. Algoritmos difíceis de paralelizar têm uma eficiência que se aproxima de zero à medida que o número de processadores aumenta.

3.3.5. Clusters

A existência de um programa com capacidades de cálculo paralelo é dependente, em última análise, da existência de um suporte físico. A presente secção faz uma descrição de dois *clusters* utilizados para a obtenção de resultados no âmbito desta dissertação.

Por um lado, na fase inicial do programa de trabalhos desta dissertação de doutoramento, foi utilizado um cluster do tipo *beowulf* (secção 3.3.5.1). Por outro lado, a utilização de um super-computador IBM (secção 3.3.5.2) tornou possível resolver problemas mais complexos, nomeadamente as simulações de remodelação óssea mostradas no capítulo 6 desta dissertação.

Conforme será evidenciado nos capítulos de resultados desta dissertação, a utilização de processamento paralelo em optimização hierárquica de problemas com dimensão moderada permite tipicamente a redução de meses de cálculo para poucos dias. Sem poder de cálculo

paralelo não teria sido possível obter em tempo útil os resultados apresentados nesta dissertação!

3.3.5.1. Beowulf cluster

A necessidade de ultrapassar as limitações impostas pelo hardware, memória e custos fez surgir a computação paralela, especialmente sob o paradigma de clusters de PCs¹ em arquitectura *Beowulf* a meio dos anos 90² (Brown 2004).

Um cluster de PCs *Beowulf* caracteriza-se por ter nós dedicados, construídos com *hardware* comum (relativamente barato e disponível em lojas de informática normais) e operando numa rede privada usando *software Open Source* (por exemplo, LINUX). O propósito desta arquitectura é a computação de alto desempenho, obtendo boas condições de escalabilidade.

No início do programa de trabalhos da presente dissertação não havia uma máquina paralela facilmente disponível para a obtenção dos resultados preliminares em tempo útil. Esta necessidade motivou a montagem de um cluster de PCs *Beowulf* na sala de computadores do LABMEST³. Ao nível do hardware este cluster é constituído por: 12 PCs (6 Pentium IV – 3.0 GHz/1GB RAM + 6 Pentium IV – 3.4 GHz/1GB RAM), 500 GB disco (6×18GB + 2×36GB+4×80GB, dos quais 35GB partilhados) e 1 Switch (100 Mb/s intranet). Ao nível do software este cluster é constituído por: sistema operativo White Box Linux 4 (versão do Red Hat Enterprise Linux 4, <http://www.whitebox.org>), LAM/MPI 7.1.1 (Burns *et al.*, 1994; Malard, 1996; Message Passing Interface Fórum, 1994; <http://www.lam-mpi.org>) e compiladores C/C++ (gcc/g++/Intel C++) Fortran (f77/fort).

A figura 3.9 mostra a sala de computadores do LABMEST para fins pedagógicos e também aproveitada como mini-centro de computação paralela de arquitectura *Beowulf*. Resultados obtidos utilizando este cluster de PCs podem ser consultados em Coelho *et al.* (2006, 2008a).

¹ Abreviatura de *Personal Computers* (Computadores Pessoais)

² Ver <http://www.beowulf.org>

³ LABoratório de Mecânica ESTRutural do Departamento de Engenharia Mecânica e Industrial da Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Nova de Lisboa.



Figure 3.9. Mini-centro de computação paralela na sala de computadores do LABMEST.

3.3.5.2. ISTcluster

O ISTcluster é uma máquina de computação de elevada performance que está instalada no Instituto Superior Técnico (IST), Universidade Técnica de Lisboa. A aquisição deste equipamento foi efectuada por um consórcio ao abrigo do programa nacional de re-equipamento científico (Rede de Computação Avançada) da Fundação para a Ciência e Tecnologia, FCT (projecto REEQ/RCA/1515).

O ISTcluster é um sistema de computação da IBM, cluster da série 1350 com um número total de 70 nós para computação, cada um com 2 processadores *dual-core*, para um total de 280 *cores*, interconectados através de uma rede de 2Gb/s *Ethernet*. Cada nó de computação é uma *blade server* 8844-PBA com 2 processadores POWER *dual core* a 2.3 GHz, com memória RAM de 2 GB por *core* (arquitectura de memória distribuída), para um total de 8 GB de memória por *blade* com um disco local de 70 GB SAS. Os resultados de *benchmark* HPL (High Performance Linpack) para este *cluster* foram de 1.6 Tflop/s. Estes testes de *benchmark* são testes de *performance* normalizados usados pelos computadores no Top 500, i.e., computadores que fazem parte do Top internacional dos 500 computadores mais rápidos do planeta.

A figura 3.10 mostra uma fotografia deste Cluster da IBM que entrou em funcionamento no início do ano de 2007.



Figure 3.10. ISTcluster.

Capítulo 4

Exemplos de Aplicação a Estruturas Mecânicas

A presente dissertação tem dois capítulos de resultados. Neste capítulo pretende-se mostrar a aplicação da optimização hierárquica às estruturas mecânicas. O capítulo 6 é dedicado às aplicações biológicas – tecido ósseo.

Pretende-se começar este capítulo de uma forma simples, considerando apenas a síntese/optimização do material, para compreender a influência de diversos factores sobre as soluções de microestrutura do material celular (secção 4.1). Depois apresentam-se os resultados da optimização concorrente da estrutura e do material utilizando alguns exemplos referidos na literatura (secção 4.2). Aproveita-se este primeiro capítulo de resultados para fazer um estudo comparativo das várias estratégias algorítmicas apresentadas no capítulo 3 utilizando um exemplo estrutural (secção 4.3). Ainda neste capítulo é estudada a escalabilidade da optimização hierárquica (secção 4.4).

4.1. Síntese de materiais celulares

O fundamento teórico dos resultados aqui apresentados encontra-se desenvolvido na secção 2.5. A síntese do material assume que este é do tipo celular de microestrutura periódica, o estado de tensão/deformação aplicado e fracção volúmica de material disponível são conhecidos e fixos. O espaço de projecto resume-se ao domínio microscópico cúbico e

unitário Y ocupado pela célula de base que repetida (Y -periódica) gera o padrão periódico. A optimização do material pode ser efectuada com uma das estratégias algorítmicas do tipo II apresentadas na secção 3.2.2 observando-se, porém, que apenas o optimizador local entra em funcionamento. Alguns dos resultados aqui apresentados reproduzem os resultados também obtidos por Sigmund (1999).

4.1.1. Estados de extensão normal e de deformação de corte particulares

Considere-se o problema de maximização da rigidez do material (2.71) onde o tensor das deformações ϵ assume valores particulares. A optimização do material parte de uma solução inicial que aqui se assume dada pela distribuição de densidades conforme apresentada na figura 4.1. Esta distribuição caracteriza-se por um valor de densidade constante atribuído às paredes da célula enquanto a densidade na restante parte interior do domínio é uniforme de valor igual ao necessário para verificar o constrangimento de volume local (2.53). Assume-se ainda o referencial cartesiano local centrado no vértice do cubo indicado na figura 4.1 e com direcções cartesianas alinhadas com as arestas do cubo.

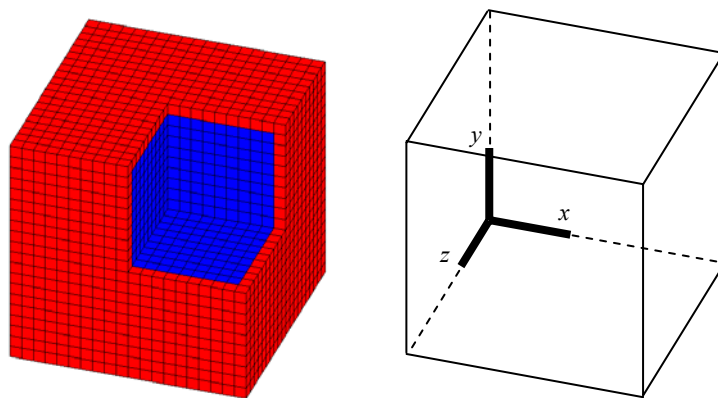


Figura 4.1. Projecto inicial do tipo caixa fechada para uma célula $20 \times 20 \times 20$. Densidade de 0.75 nas paredes e de 0.407 no interior. Fracção volúmica de 50%. Material de base com $E = 210\text{GPa}$ e $\nu = 0.3$.

Identificação do referencial cartesiano utilizado no domínio Y .

A figura 4.2 apresenta os resultados de distribuição de material obtidos para três situações de cargas normais aplicadas: (a) Triaxial; (b) Biaxial e (c) Uniaxial. Os respectivos tensores das deformações (em notação simplificada) estão identificados na legenda da figura para cada uma das situações de carga referidas. Na figura 4.2a a solução para carga hidrostática é uma

célula de paredes fechadas (tipo caixa fechada). Neste caso a permeabilidade do material resultante é nula em qualquer direcção espacial. No estado de carga biaxial da figura 4.2b a solução óptima em termos de rigidez é um laminado no plano da carga. A rigidez é nula (≈ 0) na direcção normal a esse plano. Na figura 4.2c a solução é de um tubo com eixo alinhado com a direcção de aplicação da carga. Na parte inferior destas figuras são apresentados padrões periódicos para melhor visualização do material celular associado a cada uma das células de base. A geração destes padrões pode ser realizada de forma automática no ANSYS através da execução de um programa escrito em linguagem APDL baseado fundamentalmente nas potencialidades dos comandos NGEN e EGEN.

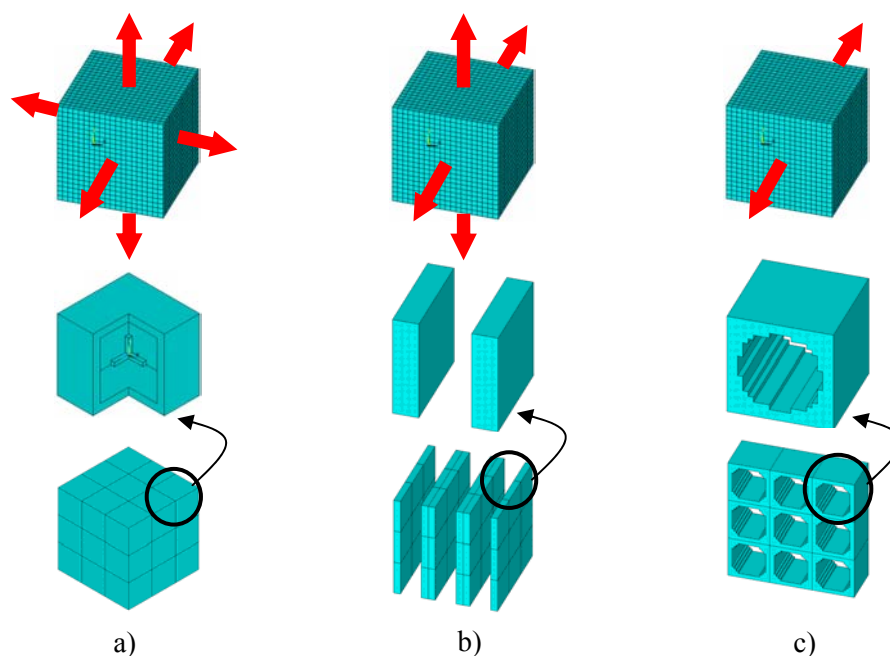


Figura 4.2. Maximização de rigidez da microestrutura considerando diferentes situações de carga normal ($e_{11}, e_{22}, e_{33}, e_{12}, e_{13}, e_{23}$) $\times 10^{-3}$: a) Triaxial ou hidrostática (1,1,1,0,0,0); b) Biaxial (0,1,1,0,0,0); c) Uniaxial (0,0,1,0,0,0).

Na figura 4.3 faz-se um estudo semelhante ao apresentado na figura 4.2 mas, neste caso, considerando estados de deformação de corte particulares. A solução apresentada na figura 4.3a corresponde a uma situação de corte generalizado, caracterizando-se por um furo circular passante na direcção octaedral. Na figura 4.3b apresenta-se a solução obtida para corte em dois planos. Obtém-se um laminado com lâminas em ângulo de 45° relativamente a um dos planos cartesianos. A situação de corte em apenas um plano conforme se mostra na figura 4.3c resulta num laminado nesse plano de forma análoga ao que acontece na situação de cargas normais num plano conforme visto na figura 4.2b ou na figura 4.3d (equivalente a

corte máximo a 45°). Na figura 4.3e consideram-se sobrepostos os casos de carga das figuras 4.3a e 4.3d, ou seja, ambos actuam em simultâneo como um único caso de carga. O resultado é um laminado a 45° semelhante ao obtido na figura 4.3b.

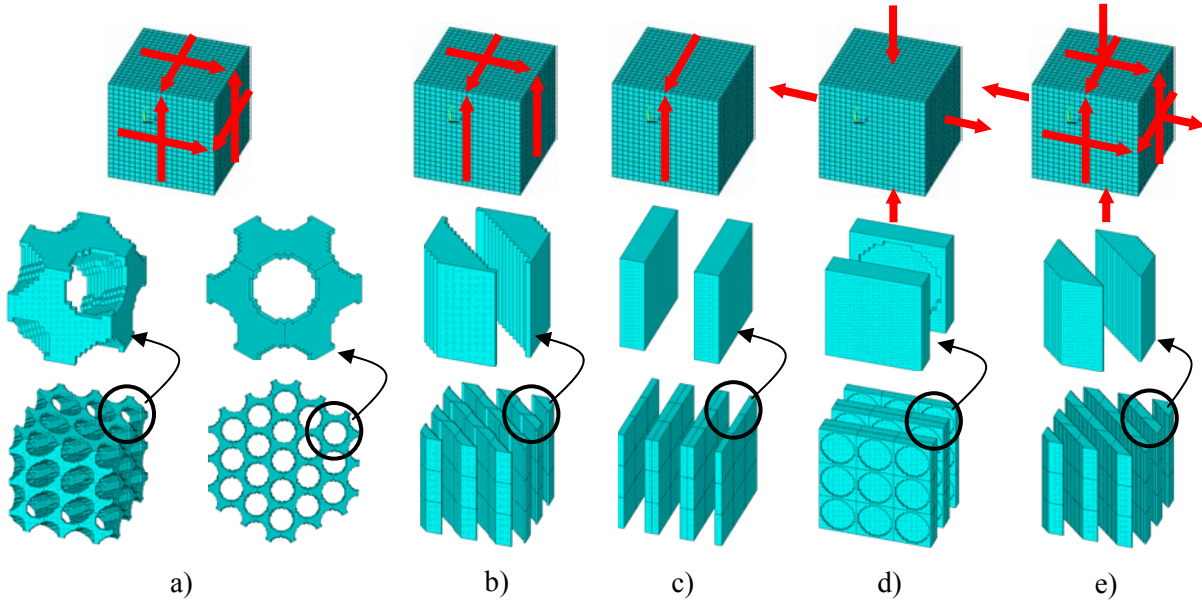


Figura 4.3. Maximização de rigidez da microestrutura considerando diferentes situações de carga de corte ($e_{11}, e_{22}, e_{33}, e_{12}, e_{13}, e_{23}$) $\times 10^{-3}$: a) Em todos os planos cartesianos (0,0,0,1,1,1), (perspectivas oblíqua e isométrica na figura); b) Em dois planos cartesianos (0,0,0,1,0,1); c) Num plano cartesiano (0,0,0,0,0,1); d) Corte máximo num plano a 45° (1,-1,0,0,0,0); e) Casos a e d sobrepostos (1,-1,0,1,1,1).

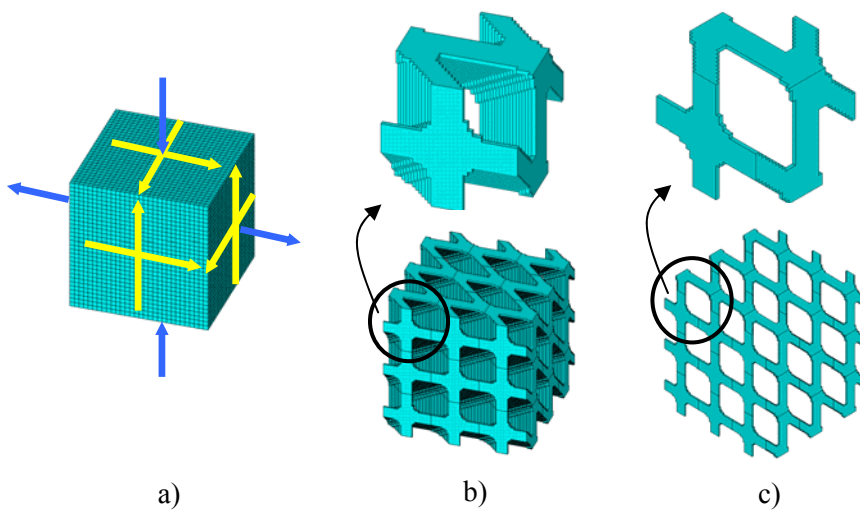


Figura 4.4. Maximização da rigidez para caso multicarga (malha 30×30×30): a) Caso 1 ($\alpha_1 = 0.5$) é corte generalizado (amarelo) e caso 2 ($\alpha_2 = 0.5$) é corte máximo num plano a 45° (azul); b) Perspectiva oblíqua; c) Perspectiva isométrica.

Compare-se agora o resultado da figura 4.3e com o da figura 4.4 que é obtido considerando os carregamentos mostrados nas figuras 4.3a e 4.3d como dois casos de carga de peso α igual ($\alpha_1 = \alpha_2 = 0.5$). Conforme se observa, o resultado em vez de ser um laminado, é do tipo da figura 4.3a mas exibindo um furo passante com secção em forma de losango. Este exemplo mostra como as soluções de projecto de materiais podem variar levando em conta vários cenários de carga possíveis. As soluções obtidas considerando múltiplos casos de carga são soluções de compromisso e, por isso, em geral apresentam-se com topologias mais complexas ou convolutas do que o obtido apenas com um caso de carga.

4.1.2. Influência da escolha da solução inicial

Em optimização de topologia de estruturas sabe-se que muitos problemas apresentam vários mínimos locais, pelo que, a solução final obtida pode depender da solução inicial escolhida (Bendsøe e Sigmund 2003). Um estudo bidimensional realizado por Guedes *et al.* (2003) levou em conta a influência da escolha da solução inicial na síntese de materiais celulares. Aqui pretende-se ganhar alguma sensibilidade relativamente ao mesmo assunto mas quando o espaço de projecto é tridimensional.

Considerem-se três tipos de soluções iniciais (SI), SI1, SI2 e SI3, conforme apresentado na figura 4.5. Em cada uma das figuras é omitido 1/8 de célula com o objectivo de tornar visível a distribuição de densidades nas regiões do interior.

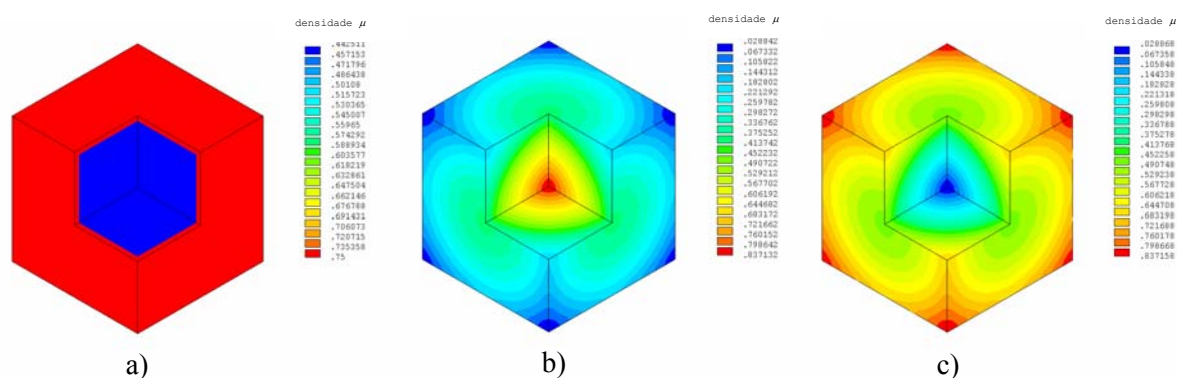


Figura 4.5. Soluções iniciais (malha 30×30×30): a) **SI 1** – Caixa de paredes fechadas (ver figura 4.1).

Variação linear da densidade com a distância ao centróide do cubo: b) **SI 2** – densidade máxima no centróide e mínima no vértice ($V = 38,5\%$); c) **SI 3** – densidade mínima no centróide e máxima no vértice ($V = 48\%$).

A solução inicial da figura 4.5a é análoga à apresentada na figura 4.1. As soluções iniciais apresentadas nas figuras 4.5b e 4.5c podem também ser vistas em Guest e Prévost (2007). Nestes dois últimos casos, faz-se variar a densidade linearmente com a distância ao centróide do cubo de tal modo que, no caso da figura 4.5b, a densidade é máxima no centróide e mínima no vértice enquanto, no caso da figura 4.5c, sucede o contrário. Em ambas as distribuições mantém-se a gama de variação dos valores da densidade microscópica, $\mu \in [0.029, 0.837]$, o que conduz a valores diferentes da fracção volúmica entre SI2 e SI3, ou seja, 38.5% e 48%, respectivamente.

Para efectuar o estudo da influência do projecto inicial na topologia final das microestruturas é escolhido o exemplo multicarga da figura 4.4. Este exemplo é executado partindo das diferentes soluções iniciais apresentadas na figura 4.5. Os resultados obtidos ao longo das iterações do processo de optimização estão apresentados na figura 4.6 para o caso de pesos de carga iguais ($\alpha_1 = \alpha_2 = 0.5$). As figuras 4.7 e 4.8 apresentam os resultados para o mesmo exemplo mas considerando combinações de pesos de carga diferentes.

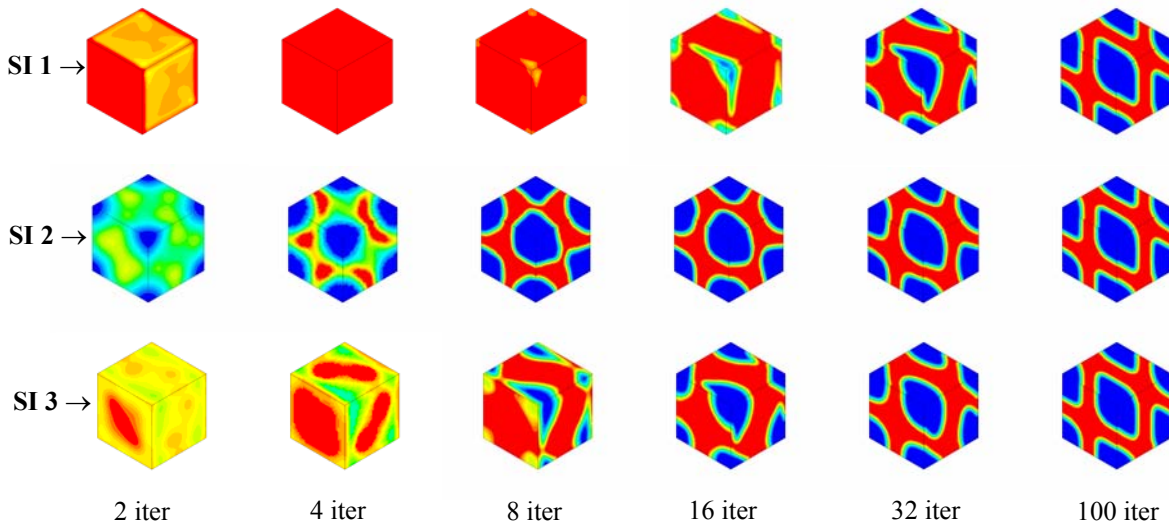


Figura 4.6. Convergência do projecto da microestrutura com o número de iterações partindo de soluções iniciais diferentes. Exemplo multicarga da figura 4.4a com pesos iguais ($\alpha_1 = \alpha_2 = 0.5$).

Densidade de energia de deformação final, $S = 23985 \text{ J/m}^3$.

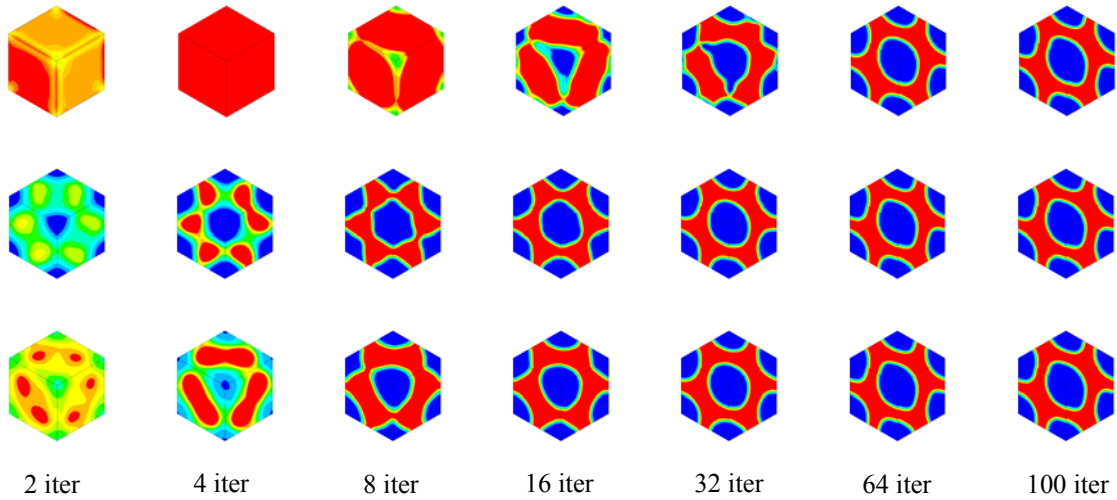


Figura 4.7. Convergência do projecto da microestrutura com o número de iterações partindo de soluções iniciais diferentes. Exemplo multicarga da figura 4.4a com pesos diferentes ($\alpha_1 = 0.25$ e $\alpha_2 = 0.75$). Densidade de energia de deformação final, $S = 30688 \text{ J/m}^3$.

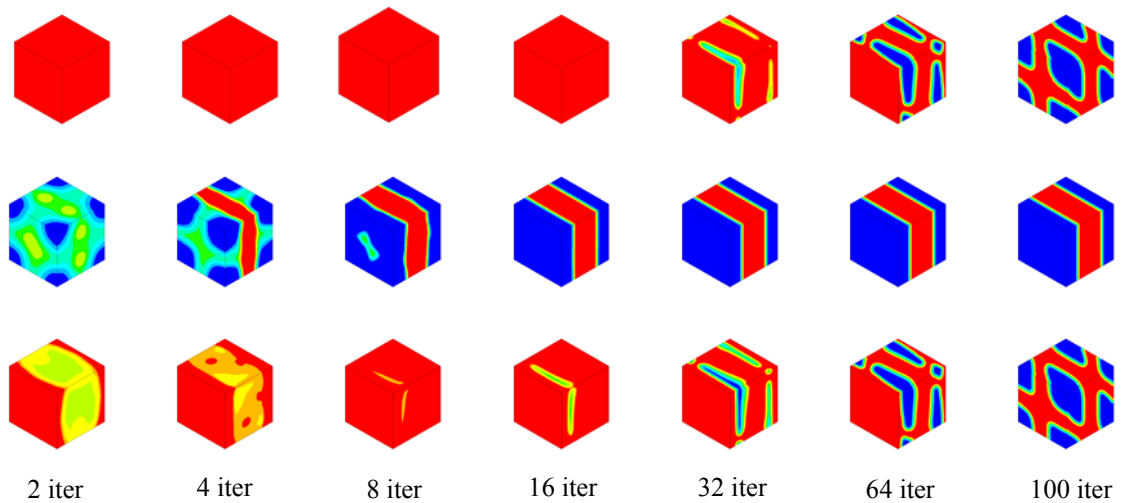


Figura 4.8. Convergência do projecto da microestrutura com o número de iterações partindo de soluções iniciais diferentes. Exemplo multicarga da figura 4.4a com pesos diferentes ($\alpha_1 = 0.75$ e $\alpha_2 = 0.25$). Densidade de energia de deformação final, $S = 17112 \text{ J/m}^3$ (casos SI 1 e SI 3) e $S = 14409 \text{ J/m}^3$ (caso SI 2).

Conforme se pode observar da análise das figuras 4.6 a 4.8, a topologia final obtida parece ser consistente partindo de soluções iniciais diferentes, excepção feita ao caso SI2 da figura 4.8 que convergiu para uma solução final diferente e que em termos de valor da função objectivo é inferior ao melhor óptimo encontrado. Este tipo de incidente não é surpresa em

optimização de topologia. Embora este exemplo mostre uma boa consistência de resultados finais partindo de soluções diferentes, pode acontecer que em outros exemplos as soluções finais sejam mais dependentes das soluções de partida. Salienta-se que os algoritmos de optimização utilizados nesta dissertação são baseados no gradiente ou na verificação das condições de óptimo do problema. Estes algoritmos convergem para mínimos locais. Portanto, sendo o problema de optimização de topologia um problema multimodal, é compreensível que nem todas as soluções iniciais consideradas convirjam necessariamente para o mesmo mínimo local.

É ainda digno de nota que, partindo de duas soluções distintas, a distribuição final de densidade no domínio da célula Y pode ser diferente, mas o padrão periódico gerado pela repetição da célula de base pode ser idêntico (obtem-se o mesmo material celular). Um exemplo desta situação é o caso do problema de maximização da permeabilidade formulado na secção 2.5.2 e cujos resultados são apresentados na figura 4.9 partindo das soluções SI 2 e SI 3. A distribuição é diferente em Y (figuras 4.9a,b) mas o padrão periódico resultante é o mesmo (comparem-se as soluções nas figuras 4.9c e 4.9d).

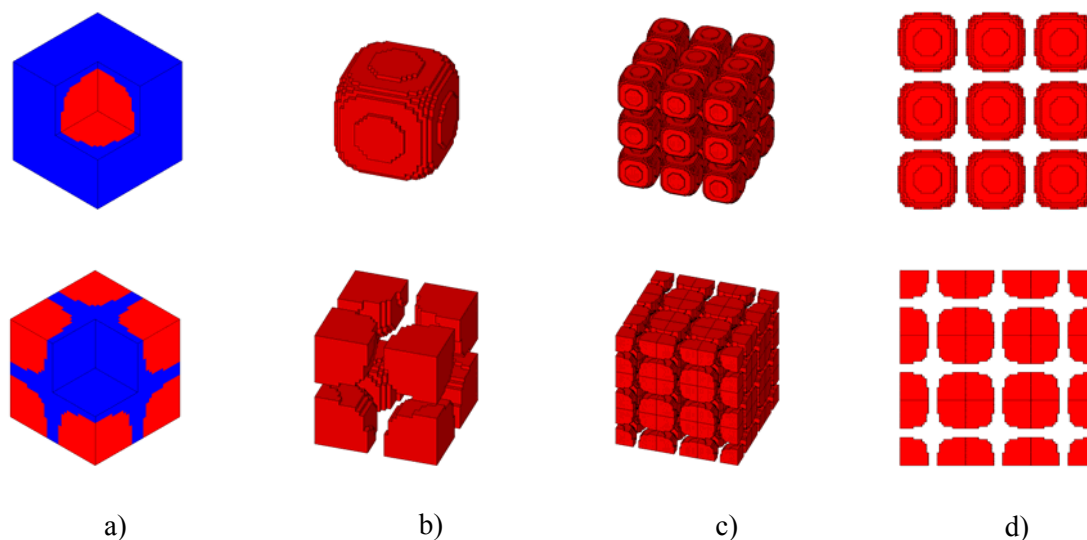


Figura 4.9. Maximização da permeabilidade material para uma fracção volúmica de 50%. Resultados para os casos SI 2 e SI 3, em cima e em baixo, respectivamente. a) Distribuição de densidade subtraindo 1/8 de célula (Vermelho – material, Azul – vazio); b) Região sólida do domínio local Y ; c) Padrão periódico da região sólida; d) Mesmo padrão periódico mas visto de topo.

4.1.3. Influência da malha de elementos finitos

A dependência das soluções de topologia da discretização da malha de elementos finitos é reconhecidamente um problema na optimização de topologia (ver Bendsøe e Sigmund, 2003). Esta dependência manifesta-se quando o aumento da discretização por elementos finitos de um mesmo domínio (refinamento da malha), mantendo-se constante a fracção volúmica, resulta numa estrutura cada vez mais perfurada ou exibindo cada vez mais pequenos detalhes. Idealmente, o refinamento da malha devia resultar numa melhor modelação por elementos finitos da mesma estrutura óptima e uma melhor definição da fronteira desta, em vez de resultar no aparecimento de sucessivos novos detalhes que caracterizam diferentes topologias finais obtidas.

Uma abordagem para gerar soluções independentes da malha é reduzir o espaço de projecto admissível através de algum modo de restrição da variação da densidade. Uma das técnicas deste tipo de restrição utilizada nesta dissertação é a técnica de filtro das sensibilidades dada pela equação (3.1), ver Sigmund (1994) e Sigmund e Petersson (1998). Esta técnica permite assegurar a existência de soluções de topologia mas, mesmo assim, a discretização da malha de elementos finitos pode ter influência no resultado final obtido conforme apresentado no exemplo da figura 4.10 (ver também Sigmund 1999). Nesta figura considera-se o caso hidrostático de carga da figura 4.2a e uma malha de EF $20 \times 20 \times 20$ onde o problema de maximização da rigidez é resolvido levando em conta diferentes fracções volúmicas admissíveis. Verifica-se que as soluções de célula de paredes fechadas estão associadas a maiores fracções volúmicas enquanto as soluções de paredes abertas associadas a menores daquelas fracções. No entanto, se o mesmo problema é resolvido com uma discretização maior ($50 \times 50 \times 50$) as soluções de paredes abertas obtidas anteriormente passam agora a ser fechadas (ver figura 4.11). Teoricamente, o resultado de rigidez máxima corresponde a uma célula de paredes fechadas. A malha de EF reproduz sempre este resultado desde que a discretização utilizada seja suficientemente fina para permitir ao material distribuir-se pelas faces do cubo sem violar o constrangimento imposto de fracção volúmica. Um efeito semelhante é apresentado no exemplo da figura 4.12. Aqui a topologia da solução final é basicamente a mesma utilizando diferentes discretizações da malha embora maiores discretizações permitam evidenciar uma tendência para “fechar paredes” na solução final obtida.

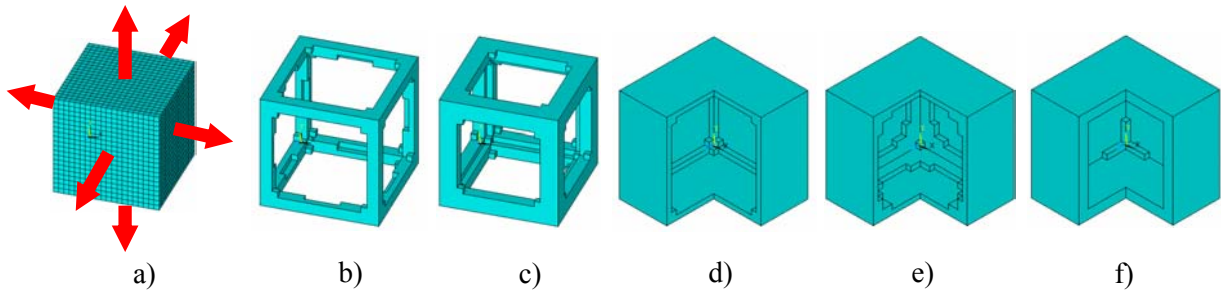


Figura 4.10. Topologia de células de base obtidas para a maximização da rigidez para o caso hidrostático/triaxial de carga e diferentes frações volúmicas V : a) Caso de carga e malha $20 \times 20 \times 20$ utilizados; b) $V = 0.1$; c) $V = 0.2$; d) $V = 0.3$ ($\frac{3}{4}$ de célula); e) $V = 0.4$ ($\frac{3}{4}$ de célula); f) $V = 0.5$ ($\frac{3}{4}$ de célula).

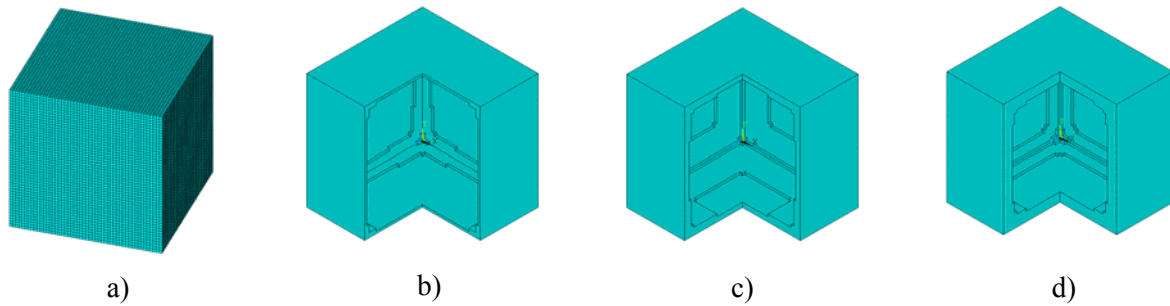


Figura 4.11. Topologia de células de base obtidas para a maximização da rigidez para o caso hidrostático/triaxial de carga e diferentes frações volúmicas V : a) Malha $50 \times 50 \times 50$; b) $V = 0.15$; c) $V = 0.30$; d) $V = 0.45$.

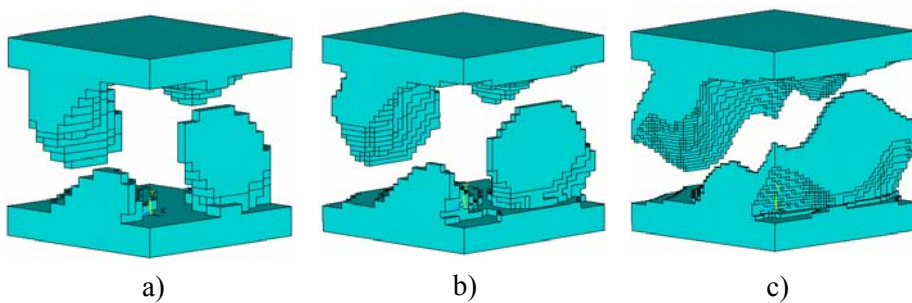


Figura 4.12. Maximização da rigidez da microestrutura para um estado de deformação pontual arbitrário $e_{ij} = (2, 1, 5, 1.5, 9, 4)$. Fração volúmica $V = 0.5$. Discretização da malha de EF utilizada: a) $20 \times 20 \times 20$; b) $30 \times 30 \times 30$; c) $50 \times 50 \times 50$.

4.1.4. Influência do constrangimento de superfície

A base teórica para os resultados apresentados nesta secção foi considerada na secção 2.5.3 ou, mais especificamente, na secção 2.5.3.1. Pretende-se que a microestrutura do material celular satisfaça requisitos mínimos de superfície. O cálculo e controlo da superfície leva apenas em conta a região interior do domínio local Y , ou seja, a sua fronteira, ∂Y , não é contabilizada na avaliação do valor da superfície.

As figuras 4.13 e 4.14 fazem a comparação de resultados com e sem constrangimento de superfície para duas situações distintas de cargas exteriores aplicadas. Em ambas as figuras a metade esquerda apresenta o resultado obtido sem considerar o constrangimento de superfície. Porém, o valor da superfície P^* é medido nestes casos. Na metade direita apresenta-se a influência do constrangimento de superfície quando este é imposto como um valor mínimo de $\beta \times P^*$, com $\beta > 1$. Na figura 4.13 a exigência por um aumento da superfície final conduz a um “arredondamento dos cantos” (esferização) da topologia cúbica inicial. No exemplo da figura 4.14 o efeito de aumentar a quantidade de superfície na topologia final consiste em introduzir interconectividades no laminado obtido inicialmente sem constrangimento de superfície. Em geral, o efeito deste constrangimento resulta numa distribuição de densidade mais convoluta no domínio da célula.

O constrangimento de perímetro/superfície reduz o espaço das soluções de topologia admissíveis. Deste modo, a técnica de redução do perímetro ou, a imposição de um valor máximo de perímetro na solução final de topologia de estruturas, tem sido utilizada para eliminar os problemas relacionados com a dependência das soluções da malha de EF e/ou *checkerboards* (vejam-se os trabalhos referidos na secção 2.5.3.1). No entanto, o propósito do constrangimento de superfície/perímetro nesta dissertação é o de satisfazer um valor mínimo imposto devido a requisitos de funcionalidade do material. Claro que, sendo utilizado o constrangimento de superfície mínima em vez de máxima, isso pode potenciar o aparecimento de problemas numéricos como o *checkerboard*. De facto, a solução de checkerboard não só corresponde a uma medida de rigidez artificialmente elevada (subetende-se a utilização de EF com funções interpoladoras de baixo grau), como também mais facilmente aumenta a quantidade de superfície. Da análise dos resultados obtidos com o constrangimento de superfície mínima, verifica-se que a influência da técnica de filtro dada por (3.1) não torna mesmo assim possível eliminar de todo os efeitos de algum *checkerboard* presente na topologia final das microestruturas. Por outras palavras, em algumas soluções de

microestrutura a distinção entre regiões com e sem material não se torna muito bem definida devido à existência de algum cinzento ou *checkerboard*, ver figura 4.14b.

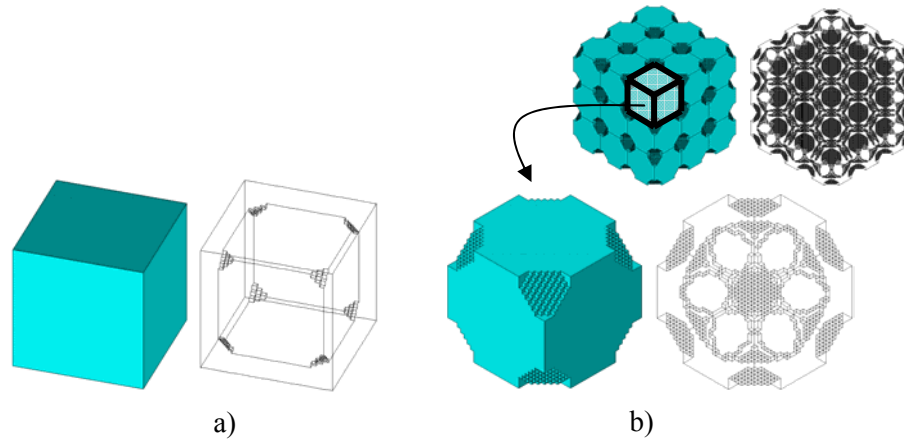


Figura 4.13. Influência do constrangimento de área de superfície. Caso de carga hidrostática, malha $30 \times 30 \times 30$ e fracção volúmica de 0.35: a) Projecto não constrangido (área de superfície = P^*); b) Projecto constrangido (área de superfície = $1.675 \times P^*$).

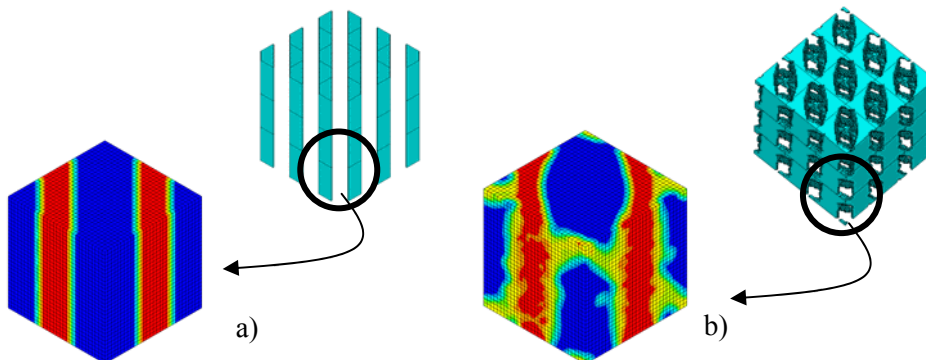


Figura 4.14. Influência do constrangimento de área de superfície. Caso de carga $e_{ij} = (-0.726, -0.143, +0.128, -0.719, +0.329, -0.988) \times 10^{-3}$, malha $30 \times 30 \times 30$ e fracção volúmica de 0.35: a) Projecto não constrangido (área de superfície = P^*); b) Projecto constrangido (área de superfície = $2 \times P^*$).

4.1.5. Influência do constrangimento de permeabilidade

Na secção 4.1.3 concluiu-se que para o caso hidrostático de carga a célula mais rígida apresenta as paredes fechadas se a malha de EF utilizada for suficientemente fina para incluir essa solução. Considere-se agora, como um dos requisitos de projecto do material, a passagem de um fluido pela microestrutura, ou seja, requisito de microestrutura permeável. A solução de paredes fechadas não satisfaz este requisito pois, pode ser porosa, mas não é permeável. Sendo assim, mantendo o critério de projecto da máxima rigidez, o problema de optimização

pode ser formulado através de (2.75) considerando um constrangimento local adicional relacionado com a permeabilidade pretendida para o material celular (secção 2.5.3.2). Esta secção reproduz alguns dos resultados já obtidos por Sigmund (1999).

O exemplo da figura 4.15 apresenta a influência do constrangimento de permeabilidade mínima de 30% em cada uma das direcções cartesianas para o caso hidrostático da figura 4.11b (solução de célula fechada sem constrangimento). A topologia final é obrigada agora a satisfazer uma permeabilidade mínima, o que resulta no aparecimento de furos nas paredes com consequente diminuição da rigidez. A solução da figura 4.15 verifica a condição de permeabilidade isotrópica de 30%, i.e., a matriz das permeabilidades é diagonal constante ($K_{ii} = 0.3$).

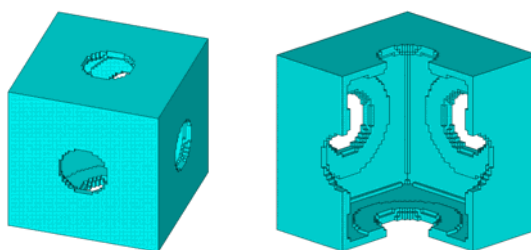


Figura 4.15. Caso da figura 4.11b com constrangimento de permeabilidade mínima de 30% em cada uma das direcções cartesianas.

Os resultados que se apresentam em seguida dizem respeito à solução do problema (2.75) com constrangimento de permeabilidade mínima de 0.3 (30%) em todas as direcções, ou seja, levando em conta os seguintes seis constrangimentos adicionais: $K_{ii} \geq 0.3$ e $K_{ij, i \neq j} = 0$, com $i, j = 1, \dots, 3$. Isto corresponde a uma situação de permeabilidade ortotrópica ou isotrópica (se K_{ii} iguais). O constrangimento de volume local é fixo em 0.5, ou seja, 50% de Y é ocupado por material. Para realizar esta optimização constrangida são escolhidos 5 casos de carga particulares apresentados anteriormente: hidrostático (figura 4.2a), biaxial (figura 4.2b), corte generalizado (figura 4.3a), corte em 2 planos (figura 4.3b) e multicarga (figura 4.4). A discretização por EF escolhida para o domínio Y é $30 \times 30 \times 30$. Vejam-se os resultados obtidos nas figuras 4.16 e 4.17. Em cada uma destas figuras a metade esquerda apresenta a parte sólida da solução de topologia enquanto a metade direita apresenta a parte correspondente a vazio ou ao subdomínio ocupado pelo fluido. Também, em cada uma das figuras, é apresentada a célula de base e o respectivo padrão periódico (quer para a parte sólida quer para o fluido).

A solução para carga hidrostática na figura 4.16 é semelhante à apresentada na figura 4.15. A solução para carga biaxial da figura 4.16 apresenta uma sequência de placas paralelas (laminado) perfuradas para permitir a passagem do fluido na direcção normal. Na figura 4.17 de cima para baixo é apresentada a influência do constrangimento de permeabilidade nos exemplos anteriores de corte generalizado (figura 4.3a), corte em dois planos (figura 4.3b) e multicarga (figura 4.4), respectivamente. Nestes últimos casos o contraste entre as topologias obtidas com e sem o constrangimento de permeabilidade é maior, revelando-se as microestruturas constrangidas bem mais convolutas.

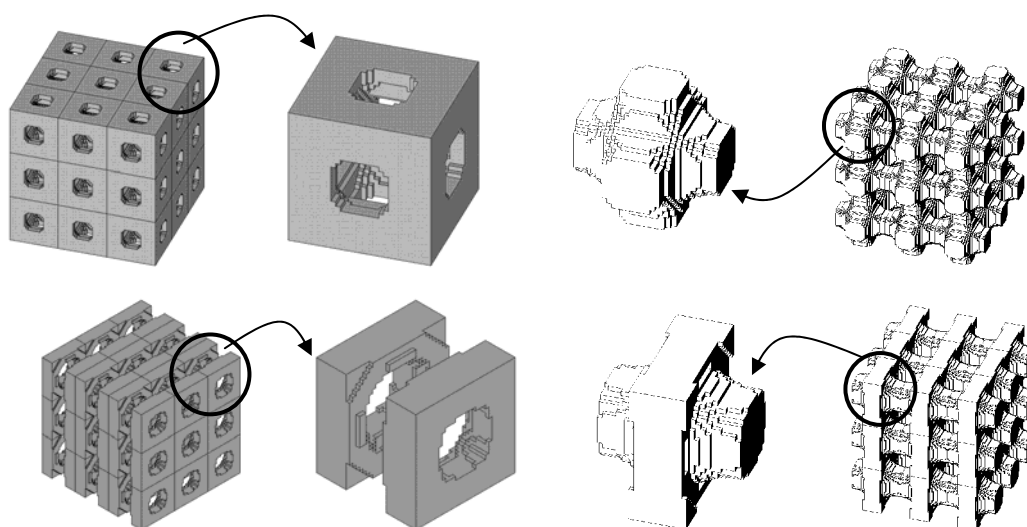


Figura 4.16. Constrangimento de permeabilidade mínima ortotrópica ($p_{min} = 30\%$). Em cima: Caso de carga hidrostática; em baixo: Caso de carga biaxial. Domínios sólido e fluido representados à esquerda e direita, respectivamente. Malha $30 \times 30 \times 30$.

Destaque-se a situação de corte em dois planos (figura 4.17-centro). Na optimização sem constrangimento de permeabilidade obtém-se um laminado a 45° (ver figura 4.3b) o que em termos de permeabilidade medida corresponde a 22.3% nas direcções cartesianas xx e zz , e a 0% na direcção normal à lâmina (ver matriz das permeabilidades na tabela 4.1). Esta situação mostra a necessidade de introduzir um constrangimento de permeabilidade que não afecte apenas as direcções cartesianas no caso de se pretender assegurar que nenhuma direcção no espaço tenha permeabilidade nula (isto é pertinente particularmente na modelação da microestrutura do osso conforme se verá à frente nos capítulos 5 e 6 desta dissertação).

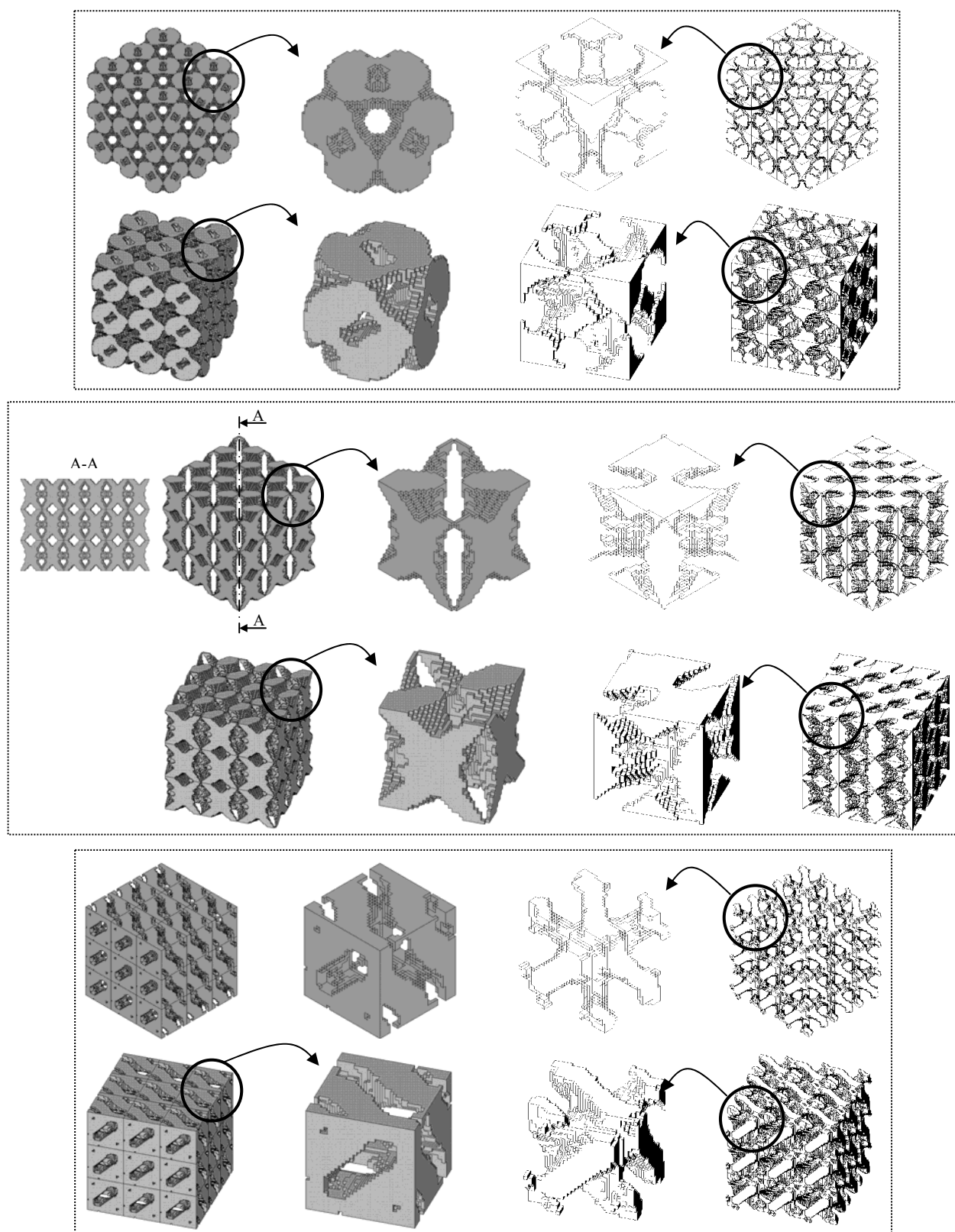


Figura 4.17. Constrangimento de permeabilidade mínima ortotrópica ($p_{min} = 30\%$). Topo: corte generalizado; Centro: corte em 2 planos; Fundo: multicarga. Domínios sólido e fluido representados à esquerda e direita, respectivamente; perspectivas isométrica e oblíqua em cima e em baixo, respectivamente. Malha $30 \times 30 \times 30$.

A figura 4.17-centro mostra que, impondo um constrangimento de permeabilidade mínima de 30% em todas as direcções espaciais, obtém-se ainda a solução de um laminado a 45° mas com perfurações nas lâminas a fim de permitir a passagem do fluido.

A tabela 4.1 apresenta as matrizes de permeabilidade homogeneizadas calculadas para cada um dos 5 casos particulares estudados nesta secção, com e sem constrangimento de permeabilidade. Observe-se que apenas o caso biaxial não é perfeitamente isotrópico pois exhibe duas componentes da diagonal ligeiramente acima de 0.3 (permeabilidade ortotrópica).

Tabela 4.1. Tensores da permeabilidade do material considerando maximização da rigidez com ou sem constrangimento de permeabilidade isotrópica e diferentes casos de carga.

	Hidrostático (Fig 4.2a)	Biaxial (Fig 4.2b)	Corte generalizado (Fig 4.3a)	Corte em 2 planos (Fig 4.3b)	Multicarga (Fig 4.4)
Sem p_{min}	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.464 & 0 \\ 0 & 0 & 0.464 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.146 & 0.146 & 0.146 \\ 0.146 & 0.146 & 0.146 \\ 0.146 & 0.146 & 0.146 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.223 & 0 & 0.223 \\ 0 & 0.446 & 0 \\ 0.223 & 0 & 0.223 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.144 & 0.144 & 0.144 \\ 0.144 & 0.144 & 0.144 \\ 0.144 & 0.144 & 0.144 \end{bmatrix}$
Com p_{min}	$\begin{bmatrix} 0.3 & 0 & 0 \\ 0 & 0.3 & 0 \\ 0 & 0 & 0.3 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.3 & 0 & 0 \\ 0 & 0.333 & 0 \\ 0 & 0 & 0.333 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.3 & 0 & 0 \\ 0 & 0.3 & 0 \\ 0 & 0 & 0.3 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.3 & 0 & 0 \\ 0 & 0.3 & 0 \\ 0 & 0 & 0.3 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0.3 & 0 & 0 \\ 0 & 0.3 & 0 \\ 0 & 0 & 0.3 \end{bmatrix}$

Tabela 4.2. Variação da rigidez e superfície do material quando o constrangimento de permeabilidade ortotrópica é considerado para diferentes casos de carga.

Caso de carga	Rigidez	Superfície
Hidrostático	-33%	-7%
Biaxial	-33%	+69%
Corte generalizado	-7%	+50%
Corte em 2 planos	-24%	+87%
Multicarga	-28%	+15%

A tabela 4.2 resume as diferenças em termos de variação de rigidez e superfície entre a aplicação ou não do constrangimento de permeabilidade em cada um dos 5 casos estudados. Em todos os casos, como seria de prever, a introdução do constrangimento de permeabilidade leva a uma diminuição da rigidez máxima. O caso hidrostático é o único em que a superfície diminui por aplicação do constrangimento de permeabilidade. Neste caso a área removida por abertura dos furos é superior à área associada ao perímetro resultante dos furos. Em todos os

restantes casos é consistente o facto da superfície aumentar com a obtenção de topologias mais convolutas para satisfazer o constrangimento de permeabilidade imposto.

4.2. Síntese concorrente da estrutura e do material

Esta secção de resultados revela as potencialidades da optimização hierárquica através de exemplos simples de estruturas mecânicas. Na secção 4.2.1 apresentam-se os resultados obtidos com a formulação (2.55) e (2.56) onde apenas se leva em conta o constrangimento de volume. Na secção 4.2.2 os resultados apresentados são obtidos com a formulação (2.83) e (2.84) que, para além do constrangimento local de volume, leva em conta outro tipo de constrangimentos locais de projecto (superfície/permeabilidade).

4.2.1. Restrições no volume de material

A definição mais simples do problema de optimização hierárquica da topologia de estruturas é semelhante ao problema clássico de optimização de topologia que consiste em minimizar a *compliance* sujeito a um constrangimento de volume de material disponível. Os exemplos das próximas secções são clássicos da literatura de optimização de topologia de estruturas. Pretende-se aqui mostrar um leque de soluções diferentes evidenciando alguns detalhes referidos nos capítulos anteriores. Nomeadamente, destacam-se a verificação das condições de óptimo do problema, alguns problemas numéricos como o *checkerboard*, a influência da formulação multicarga, etc.

4.2.1.1. Viga em consola

O exemplo da viga em consola (*cantilever beam*), apresentado na figura 4.18, foi usado em Coelho *et al.* (2007a) para comparar as estratégias OC, MMA e MMA/OC entre si. Porém, aqui são apenas apresentados os resultados obtidos com a estratégia MMA/OC. A figura 4.18 mostra as condições fronteira de deslocamento imposto numa extremidade (encastramento) e a força aplicada na outra extremidade. A solução de topologia obtida através do método SIMP é apresentada nesta figura. O constrangimento de volume global é fixo em 35% e assume-se um material de base linear isotrópico ($E = 210\text{GPa}$ e $\nu = 0.3$).

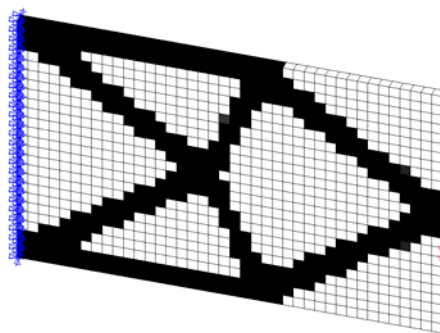


Figura 4.18. Optimização de topologia de uma viga consola. Malha de elementos finitos utilizada e condições fronteira. Projecto obtido com o modelo SIMP.

Considere-se agora a optimização hierárquica neste exemplo. A malha de EF para o problema local é $20 \times 20 \times 20$ (ver secção 3.1) e uma técnica de filtro (ver equação 3.1) é usada para evitar *checkerboard* na topologia final das microestruturas. A malha de EF do domínio da estrutura é $40 \times 25 \times 1$, porém, neste caso, é visível *checkerboard* na topologia final da estrutura quando são utilizados elementos hexaedros de 8 nós sem qualquer técnica de filtro, ver figura 4.19a. Nesta figura faz-se uma ampliação de um subdomínio da estrutura para evidenciar esse *checkerboard*. No entanto, em vez da alternância entre "brancos" e "pretos" (0's e 1's), usual no problema de optimização de topologia discreto ou com o método SIMP, obtém-se neste caso alternância entre vários níveis de cinzento (valores intermédios da densidade macroscópica). A figura 4.19b apresenta o resultado que se obtém com EF de ordem superior, hexaedros de 20 nós, onde o efeito de *checkerboard* é praticamente eliminado. O projecto compósito da figura 4.19a representa uma redução da *compliance* de 15% relativamente ao projecto obtido pelo método SIMP da figura 4.18.

Recorde-se que a estratégia MMA/OC realiza uma iteração nos problemas locais por cada iteração no problema global. Usando este esquema iterativo o *lay-out* da estrutura evolui com o projecto do material de forma concorrente de modo a evitar-se qualquer solução fixa ou prematura quer para o material quer para a estrutura.

As soluções de microestruturas caracterizando o material são apresentadas na figura 4.20 para os elementos finitos macroscópicos seleccionados. Nas zonas junto do encastramento e de aplicação da carga existem soluções de material cheio (maciço). Nas fibras superiores e inferiores da viga as soluções de material celular correspondem ao tipo tubular com eixo do furo alinhado com as tensões normais que são máximas nestas zonas (compare-se com figura 4.2c). Na região entre as fibras superior e inferior, a solução de material celular é do tipo

laminado para resistir essencialmente ao campo de tensões de corte que são máximas nesta zona (compare-se com figura 4.3c e 4.3d).

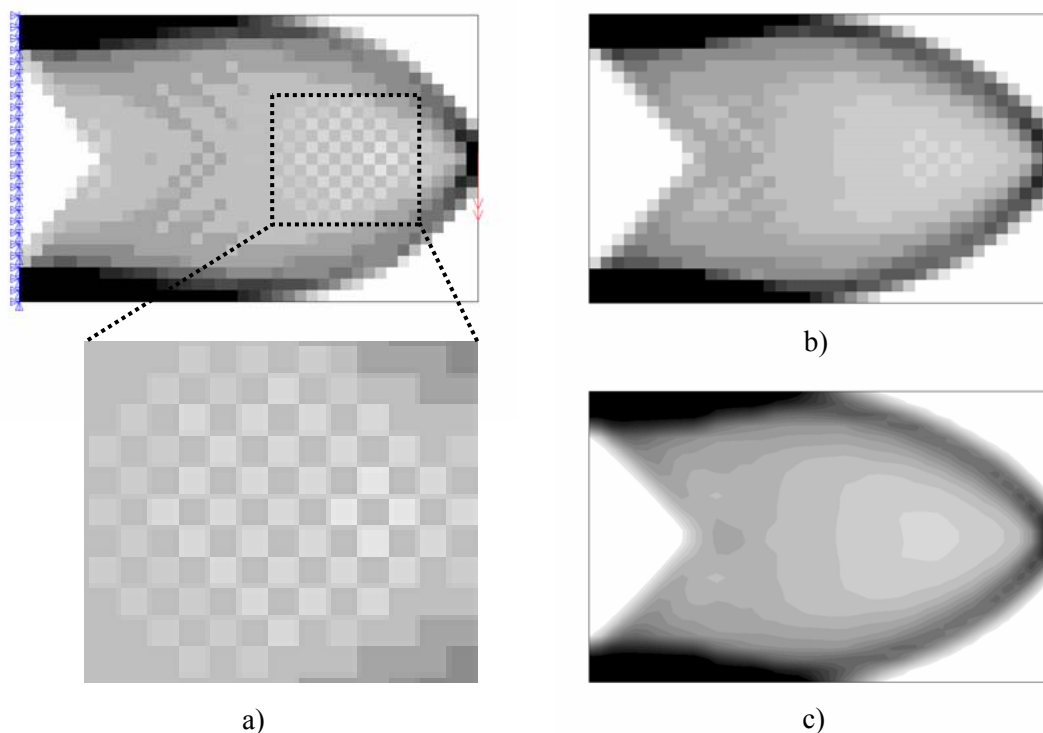


Figura 4.19. Projecto compósito obtido com o modelo hierárquico: a) *Checkerboard* em evidência no modelo constituído por elementos hexaedros de 8 nós na escala macroscópica; b) Utilização de elementos de 20 nós na macroescala com conseqüente redução do efeito de *checkerboard*; c) Resultado da figura anterior fazendo a média dos valores de densidade nos nós.

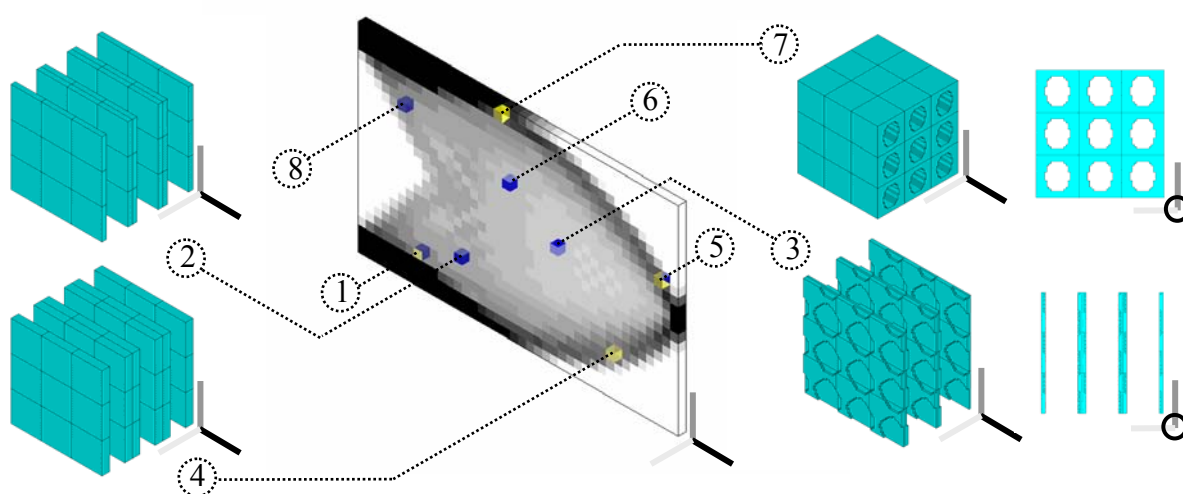


Figura 4.20. Projecto compósito ao centro e as microestruturas obtidas para alguns elementos da macroescala seleccionados (mostrados padrões periódicos 3×3×3).

A figura 4.21 apresenta o comportamento do algoritmo MMA/OC na optimização do problema da viga em consola. A figura 4.21a apresenta o histórico de convergência do algoritmo em termos do valor da função objectivo. A figura 4.21b apresenta a evolução do constrangimento de volume global ao longo das iterações. A solução inicial corresponde a uma célula do tipo apresentado na figura 4.1 que verifica o constrangimento de volume global. Partindo de uma solução inicial admissível, não existe violação do constrangimento de volume global quando é utilizado o MMA. A pesquisa é realizada em pontos do domínio admissível de projecto. A figura 4.20c apresenta a variação dos multiplicadores de Lagrange associados aos constrangimentos locais de volume (para os EF seleccionados da figura 4.20) ao longo das iterações. Visto que em cada EF-macro existe um problema local, existem tantos λ 's quantos os EF-macro. Recorde-se das secções 2.4 e 2.6 que estes multiplicadores de Lagrange fazem parte da informação de sensibilidade da função objectivo global. A satisfação das condições de óptimo (condições de *Karush-Kuhn Tucker* – KKT) implica que todos aqueles multiplicadores sejam iguais no óptimo, sempre que $0 < \rho < 1$ (veja-se este aspecto na convergência dos λ 's na figura 4.21c). A figura 4.21d apresenta a evolução das densidades macroscópicas para os EF-macro seleccionados ao longo das iterações.

Comparando as figuras 4.21c e 4.21d, as oscilações em ρ e λ ao longo das iterações estão inter-relacionadas. Por cada iteração no problema global são actualizadas as densidades ρ e avança-se uma iteração em cada problema local que recebe ρ como a nova fracção volúmica de material disponível na microestrutura. Sendo assim, é imperativo evitar grandes saltos nas variáveis ρ entre iterações consecutivas pois, caso contrário, resultam grandes oscilações no problema local com consequências de instabilidade também para o problema global. A sensibilidade do problema global é dada pelo multiplicador de Lagrange associado ao constrangimento de volume local que é dependente de ρ . No MMA pequenos saltos nas actualizações de ρ são facilmente conseguidos actuando sobre os limites móveis α e β conforme definidos em Svanberg (1987).

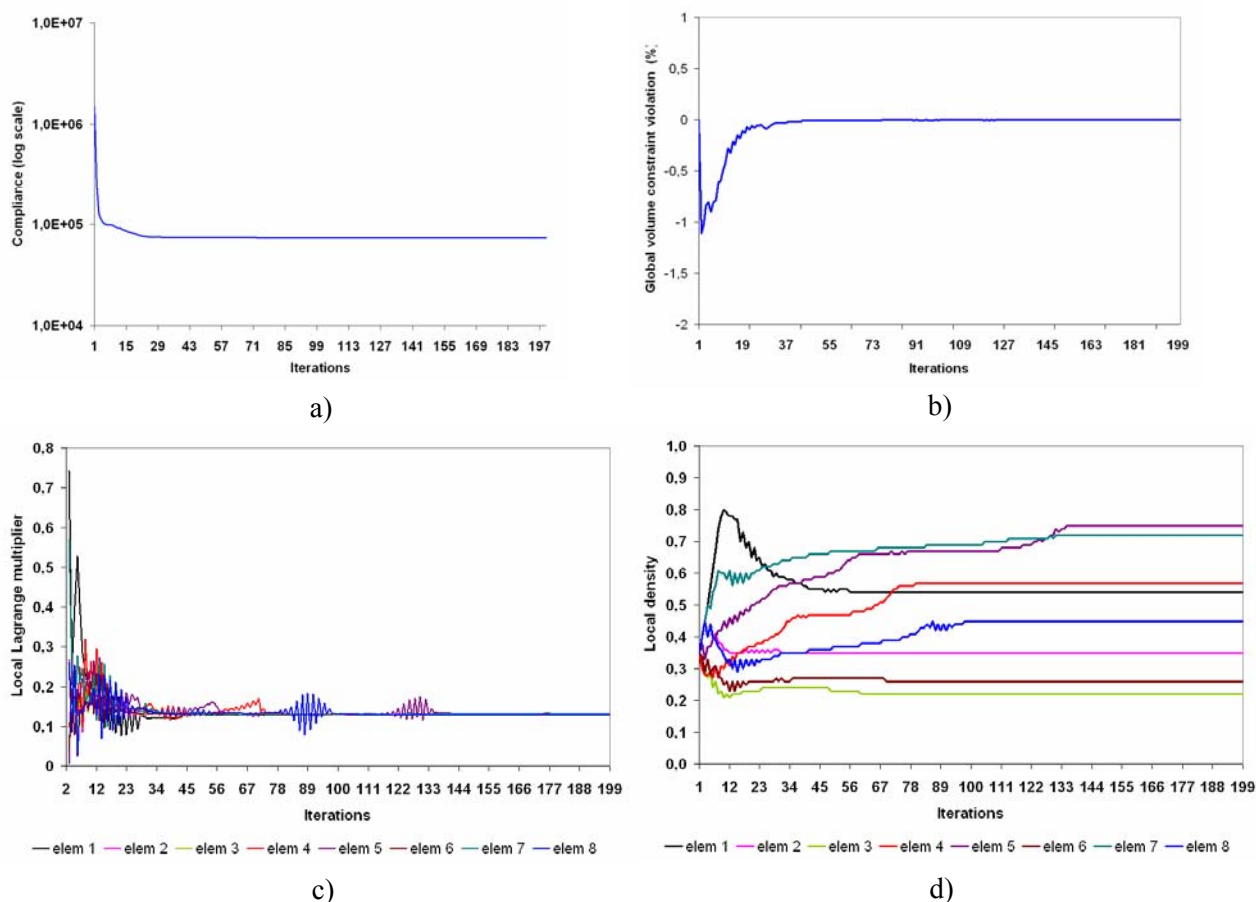


Figura 4.21. Histórico de convergência do algoritmo MMA/OC: a) Função objectivo global; b)

Violação do constrangimento de volume global; c) Multiplicador de Lagrange associado ao constrangimento de volume local em cada um dos elementos seleccionados; d) Evolução da densidade em cada elemento (extraído de Coelho *et al.*, 2007a).

4.2.1.2. Arco de Ponte

O exemplo estrutural conhecido como Arco de Ponte (*bridge arch*) é utilizado aqui com duas situações de apoio diferentes conforme se mostra na figura 4.22. As soluções de topologia pelo método SIMP também são apresentadas nesta figura.

Por um lado, as condições de apoio da figura 4.22a correspondem a um exemplo que na literatura é designado também por roda da bicicleta (*bicycle wheel*). Os deslocamentos impostos correspondem a condições de simetria a meio-vão e de suporte simples numa zona próxima da extremidade. Por outro lado, na figura 4.22b encontram-se aplicadas condições de simetria de modo a representar-se $\frac{1}{4}$ do domínio da estrutura e apenas os nós do canto inferior esquerdo representado encontram-se sujeitos a uma condição de apoio simples. Em cada um

dos exemplos, uma carga vertical é aplicada a meio-vão. A malha utilizada na discretização do domínio da estrutura é $32 \times 32 \times 1$. Outras características do modelo numérico são semelhantes ao referido no exemplo anterior.

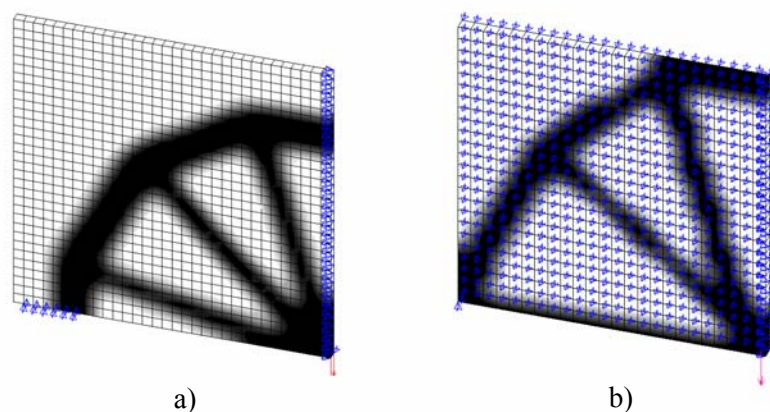


Figura 4.22. Optimização de topologia do exemplo Arco de Ponte considerando modelo SIMP e duas situações de apoios diferentes: a) Simetria num plano e apoios simples na zona próxima da extremidade inferior; b) Simetria em dois planos e apoio simples nos nós da extremidade inferior.

Neste caso, a estratégia algorítmica MMA/CONLIN foi utilizada para obter o projecto compósito. Em termos do valor da função objectivo, os projectos compósitos das figuras 4.23a e 4.23b representam uma redução de 19% e 11% relativamente aos projectos das figuras 4.22a e 4.22b, respectivamente. Comparando as distribuições de densidade macroscópica na figura 4.23, é digna de nota a influência das condições de apoio que fazem a diferença entre o aparecimento ou não de um banzo inferior.

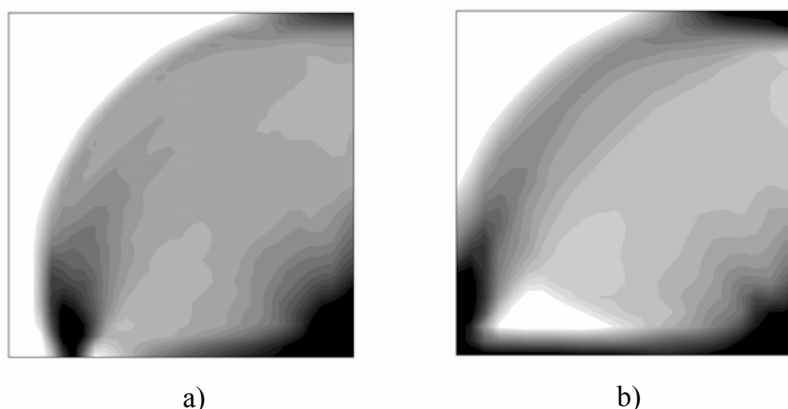


Figura 4.23. Projecto compósito (média dos valores nodais da densidade): a) Simetria num plano e apoios simples perto da extremidade ($1/4$ roda da bicicleta); b) Simetria em dois planos e apoio simples nos nós da extremidade (banzo inferior).

A figura 4.24 apresenta algumas soluções típicas dos problemas locais (microestruturas periódicas) para alguns pontos da estrutura Arco de Ponte com malha $24 \times 24 \times 1$ e condições de apoio da figura 4.23b. As soluções para as zonas dos banzos superior e inferior correspondem a material maciço ($\rho = 1$) ou celular do tipo tubular ($0 < \rho < 1$) com os eixos dos tubos alinhados com a direcção das tensões normais que atingem valores máximos exactamente nestas zonas extremas. O estado de tensão predominante entre os referidos banzos é de corte por isso a solução óptima local é do tipo laminado conforme se mostra na figura 4.24. À semelhança do que foi apresentado para o exemplo anterior, a figura 4.25 apresenta a convergência ao longo das iterações dos multiplicadores de Lagrange bem como a variação da densidade macroscópica para os EF-macro seleccionados.

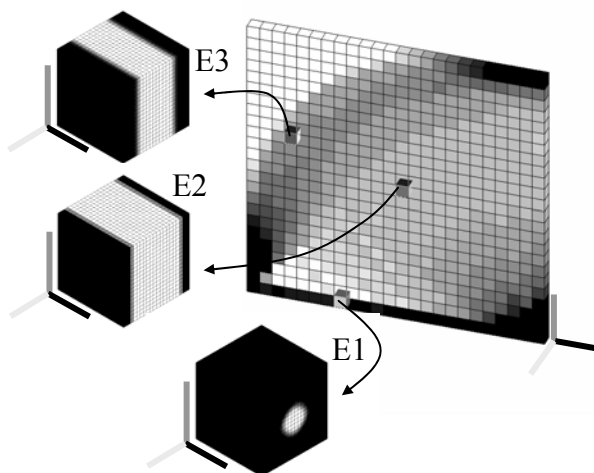


Figura 4.24. Projecto compósito (densidade constante em cada elemento) e microestruturas (células de base) obtidas para alguns elementos finitos seleccionados no domínio da estrutura. Exemplo com simetria em dois planos e apoio simples nos nós da extremidade (ver fig. 22b).

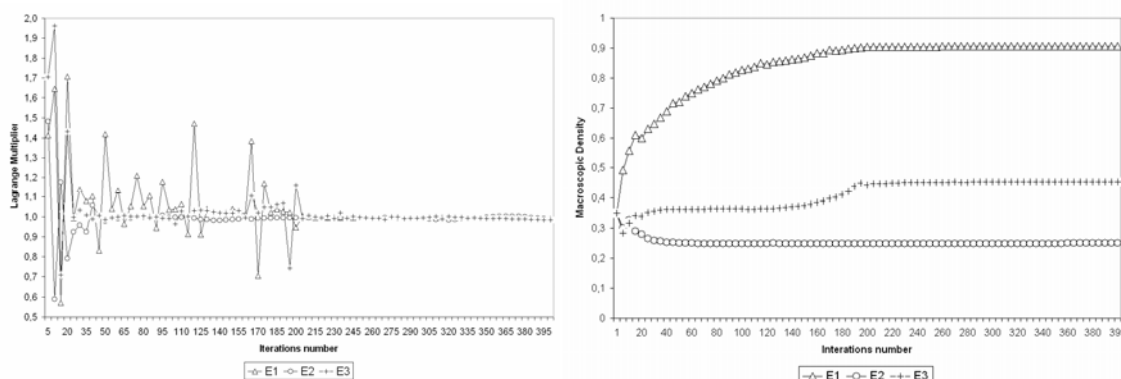


Figura 4.25. História de convergência dos multiplicadores de Lagrange locais (à esquerda) e variação da densidade macroscópica (à direita) para os elementos seleccionados da figura 4.24 (estratégia MMA/CONLIN).

4.2.1.3. Caixa oblonga

O exemplo estrutural da caixa oblonga também é um clássico da literatura. O problema consiste numa viga encastrada em ambas as extremidades sujeita a um binário aplicado a meio-vão. A simetria do problema permite simplificá-lo conforme se mostra na figura 4.26a. O domínio macroscópico é discretizado com a malha regular $50 \times 10 \times 5$ (2500 EF). A solução de topologia utilizando o método SIMP é apresentada nas figuras 4.26b e 4.27.

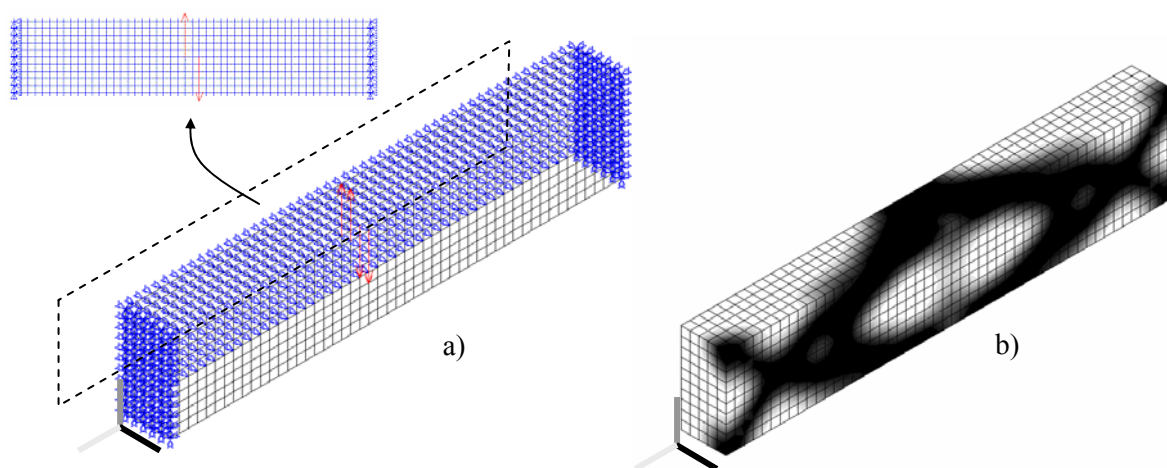


Figura 4.26. Optimização de topologia do exemplo caixa oblonga: a) Malha de elementos finitos e condições de fronteira aplicadas, extremidades encastradas, simetria no plano posterior e momento aplicado no centro; b) Projecto obtido com o modelo SIMP (média dos valores nodais da densidade).

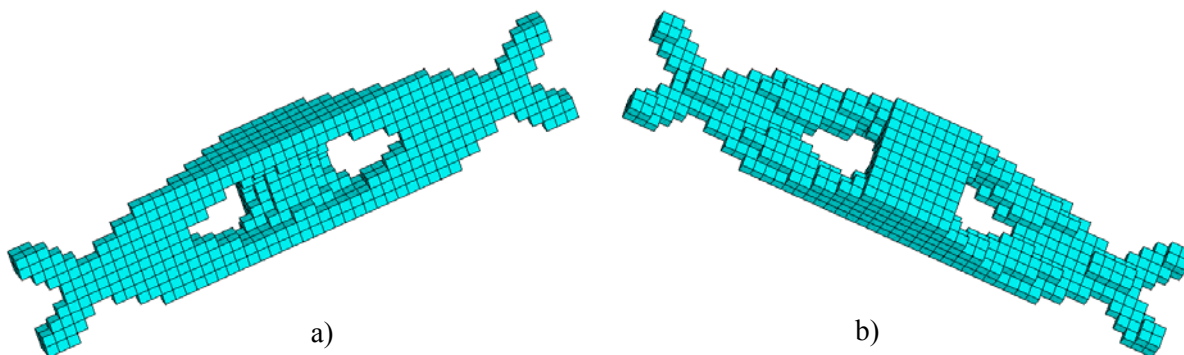


Figura 4.27. Projecto obtido com o modelo SIMP depois de seleccionados os elementos com densidades entre 0.5 e 1: a) Vista oblíqua anterior; b) Vista oblíqua posterior.

O projecto composto foi obtido após optimização hierárquica utilizando a estratégia MMA/CONLIN e representa um decréscimo de 6% em termos do valor da *compliance* relativamente ao projecto SIMP. O projecto composto apresenta-se na figura 4.28 através de uma representação por fatias para melhor compreensão da distribuição das densidades nas

regiões do interior do domínio de projecto. O interesse deste exemplo consiste em mostrar uma distribuição de densidade macroscópica mais tridimensional do que a obtida nos exemplos anteriores. Contudo, a nível de soluções locais de microestrutura não existe muita diferença comparativamente aos exemplos anteriores, ou seja, as microestruturas mais rígidas para o carregamento aplicado (especialmente quando se tem um caso de carga) são basicamente tubos, laminados ou sólidos (maciços).

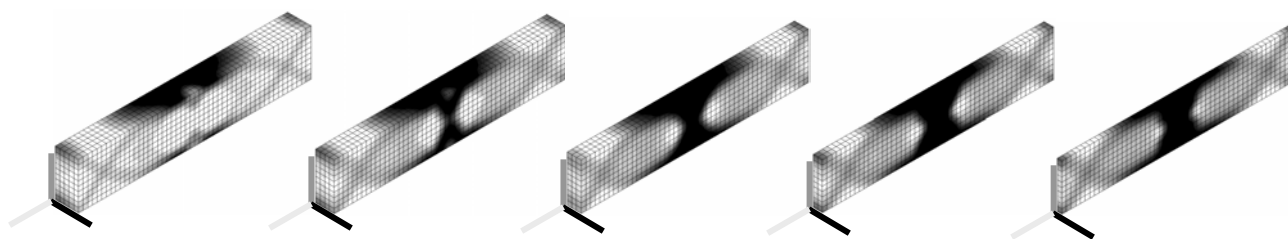


Figura 4.28. Projecto compósito obtido com o modelo hierárquico. Representadas várias fatias do domínio da estrutura para compreensão da distribuição das densidades nas regiões do interior.

4.2.1.4. Exemplos multicarga

Os resultados apresentados nesta secção são semelhantes aos apresentados em Coelho *et al.* (2008a). Sobretudo, procura-se mostrar aqui a influência de uma situação multicarga na optimização hierárquica de estruturas.

O exemplo da figura 4.29 apresenta uma viga simplesmente apoiada e sujeita a duas cargas exteriores aplicadas. A malha de EF macroscópica é regular: $64 \times 32 \times 1$ (2048 EF). Dependendo do modo como as cargas são aplicadas, um caso de carga ou dois casos de carga, assim a topologia final pode diferir substancialmente. Nas figuras 4.29a e 4.29b apresentam-se as topologias obtidas pelo método SIMP na situação das cargas aplicadas simultaneamente (um caso de carga) ou a situação multicarga (cargas combinadas actuando uma de cada vez), respectivamente.

Na topologia da figura 4.29a identifica-se bem uma região de vazio na parte central da viga porque as duas cargas aplicadas em simultâneo são descarregadas directamente nos suportes através das partes laterais da estrutura reticulada. O correspondente projecto compósito obtido através da optimização hierárquica apresentado na figura 4.30a revela uma estrutura praticamente idêntica. De facto, em termos do valor da função objectivo (*compliance*) a redução que se consegue com o projecto compósito é de apenas 3.3%. O mesmo já não acontece na situação multicarga. Neste caso, conforme se observa na figura 4.29b, a topologia

obtida pelo método SIMP caracteriza-se pelo aparecimento de duas barras a reforçar a zona central da viga. Este projecto é óptimo quando as cargas são aplicadas uma de cada vez (aqui o peso α de cada caso de carga é igual). Relativamente ao projecto compósito, a zona central de vazio na figura 4.30a é substituída agora por uma região de material celular (cinzento) para suportar os diferentes campos de tensão/deformação devido a cargas múltiplas, ver figura 4.30b. A redução do valor da função objectivo (*compliance*) que se consegue agora com o projecto compósito é bem mais significativa, ou seja, 18%.

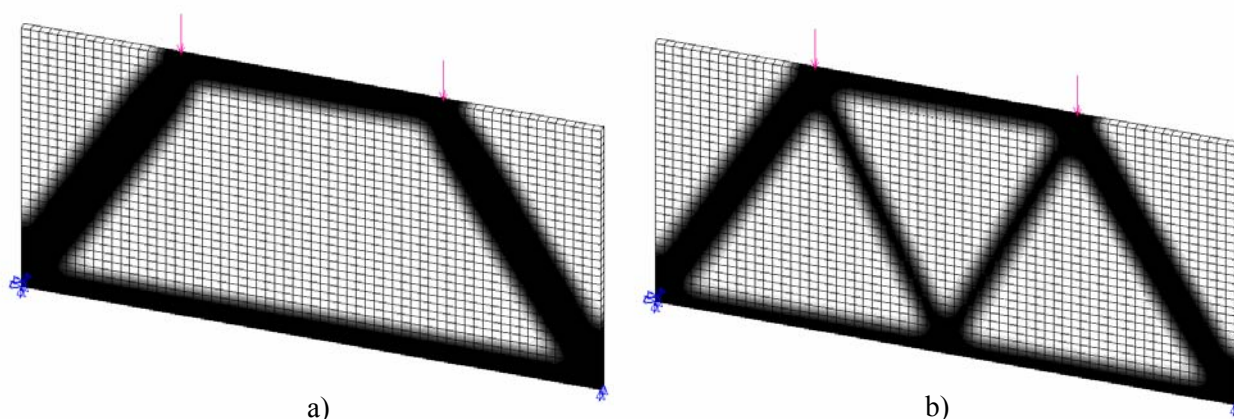


Figura 4.29. Optimização de topologia de uma viga simplesmente apoiada e sujeita a duas cargas verticais. Projecto obtido com o modelo SIMP (média dos valores nodais da densidade): a) Cargas aplicadas simultaneamente (um caso de carga); b) Cargas aplicadas em separado (caso multicarga).

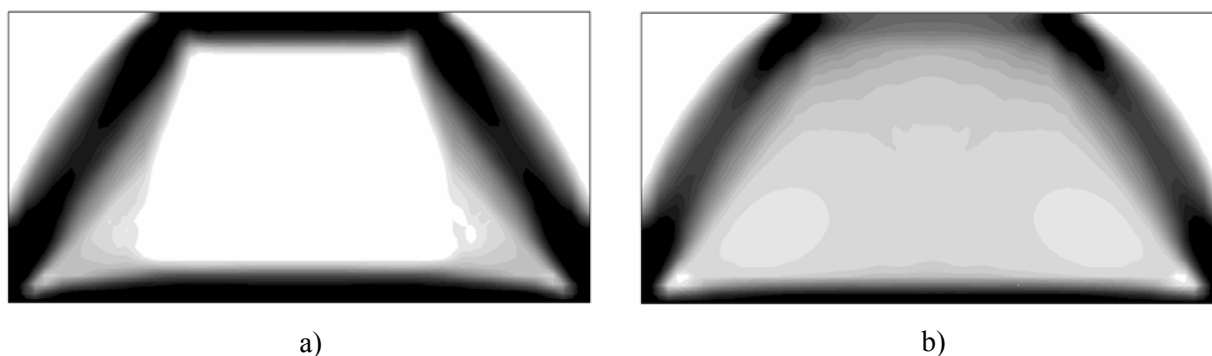


Figura 4.30. Projecto compósito obtido com o modelo hierárquico (média dos valores nodais da densidade): a) Cargas aplicadas simultaneamente (um caso de carga); b) Cargas aplicadas em separado (caso multicarga).

Em todas as soluções de topologia das figuras 4.29 e 4.30 é visível um banzo inferior longitudinal devido a uma condição de apoio simples nas extremidades. No que diz respeito às microestruturas dos projectos compósitos, basicamente não existe novidade em relação ao tipo de soluções já obtidas nos exemplos anteriores. Resumindo, são identificados três tipos

de solução de microestruturas. Primeiro, existem soluções de material maciço nas zonas junto aos apoios. Segundo, nas fibras superior e inferior da viga, o material celular é do tipo tubular com os eixos alinhados com as forças normais que são máximas nestas zonas. Terceiro, na região entre aquelas fibras, o material celular é do tipo laminado para resistir ao campo das forças de corte.

A figura 4.31 apresenta outro exemplo estrutural com restrição no volume de material. Considere-se então a viga em consola da figura sujeita a uma condição de cargas múltiplas, P_1 e P_2 , que resulta numa combinação de esforços internos de flexão, corte e torção. A malha global é de $16 \times 7 \times 5$ e o constrangimento de volume global é 35%. Em Coelho *et al.* (2008a) são apresentados resultados de projecto compósito obtidos com o modelo de optimização hierárquica desta dissertação utilizando a estratégia algorítmica OC em paralelo (secção 3.2.1.1). Nesta secção da dissertação os resultados apresentados na figura 4.32 são obtidos com a estratégia MMA/CONLIN. É digno de nota o facto destas diferentes estratégias terem conduzido a topologias finais ligeiramente diferentes na zona de aplicação das cargas, porém, em termos do valor da função objectivo, o resultado é o mesmo (8910 J para a energia total de deformação).

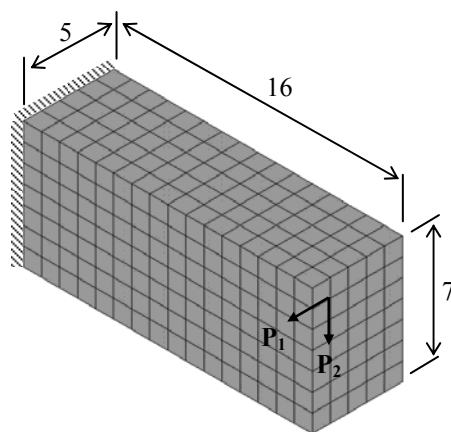


Figura 4.31. Viga em consola sujeita a situação multicarga.

Na figura 4.32, a representação do tipo desenho explodido é utilizada para facilidade de interpretação dos resultados de distribuição da densidade macroscópica nas regiões do interior do domínio da estrutura. A solução de topologia do tipo tubular mostrada surge como um balanço óptimo entre esforços de flexão e torção.

Na figura 4.33 observam-se várias fatias do domínio da estrutura para mostrar a distribuição de densidade no seu interior. Para os EF macroscópicos seleccionados nesta

figura, apresentam-se também as soluções de material (microestruturas), basicamente são tubos e laminados.

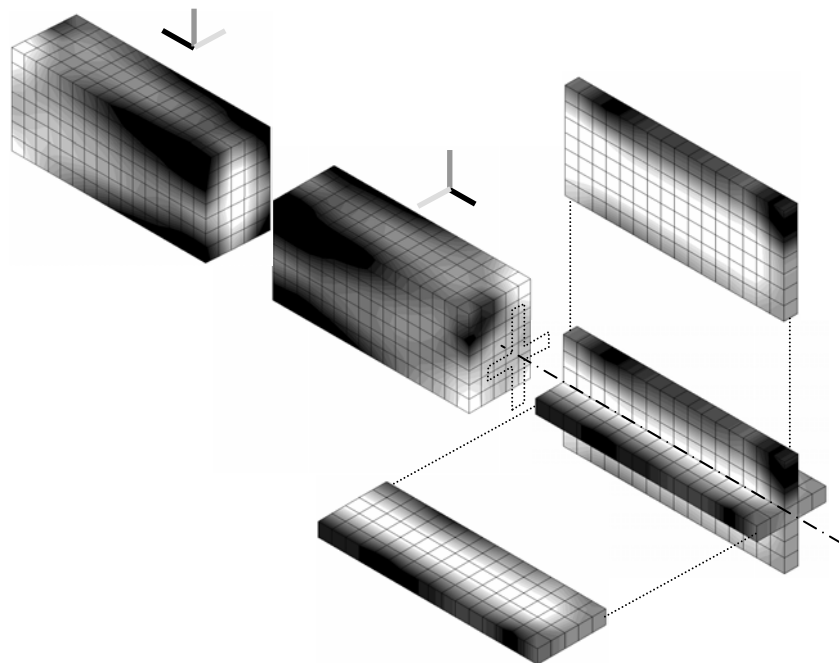


Figura 4.32. Distribuição da densidade macroscópica (média dos valores nodais da densidade).

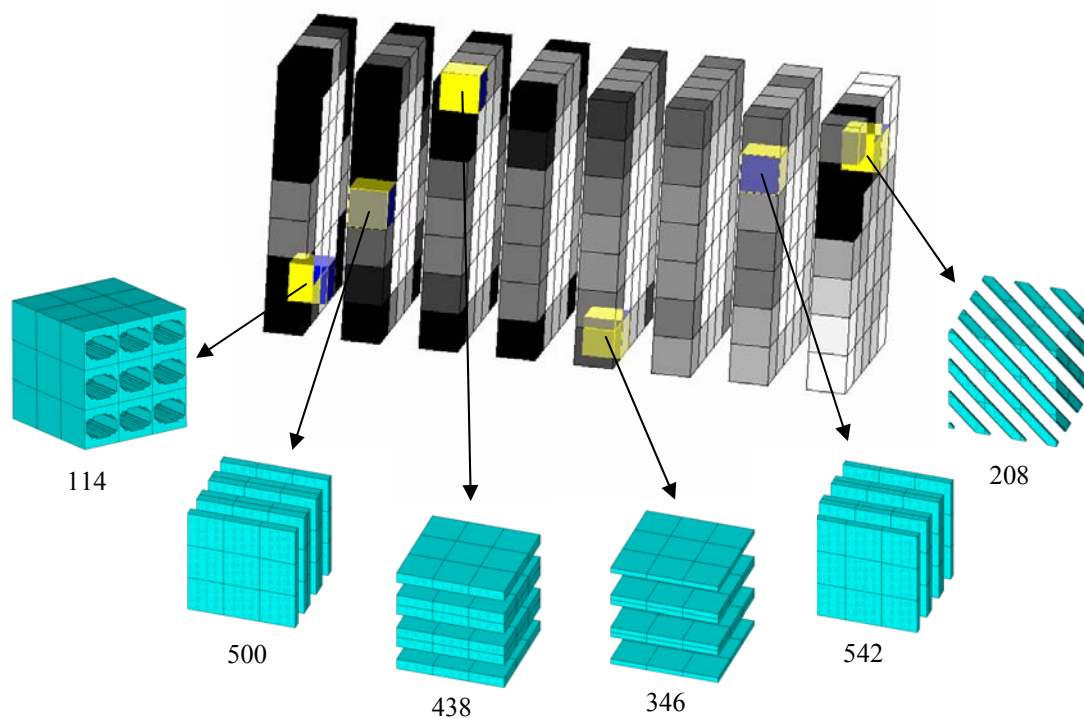


Figura 4.33. Fatias do domínio da estrutura (representação discreta da densidade macroscópica). Elementos finitos macroscópicos seleccionados para representação de algumas microestruturas (representados padrões periódicos).

4.2.2. Restrições de projecto da microestrutura

O interesse pelo projecto de compósitos com restrições de projecto da microestrutura do material pode colocar-se por razões de fabrico e/ou funcionais. Na secção anterior a única restrição local considerada dizia respeito à fracção volúmica. Nesta secção acrescentam-se outro tipo de restrições locais envolvendo, por exemplo, a quantidade de superfície disponível por unidade de volume e a permeabilidade. A apresentação de resultados com este tipo de restrições adicionais no caso das estruturas mecânicas pode ser útil em aplicações industriais. No entanto, o principal objectivo aqui é o teste deste tipo de restrições com estruturas simples como preparação para o problema mais complexo de remodelação óssea abordado a partir do capítulo 5 desta dissertação, onde a superfície e a permeabilidade assumem um papel biológico relevante.

Para efectuar a síntese concorrente da estrutura e do material com restrições de projecto da microestrutura deve considerar-se a formulação do problema dada por (2.83) e (2.84). Quanto às estratégias algorítmicas mais apropriadas para resolver este problema salientam-se as do tipo II (secção 3.2.2) pois permitem tratar com mais facilidade múltiplos constrangimentos locais. Mais especificamente, utiliza-se aqui a estratégia MMA/CONLIN.

Para ilustrar a aplicação de um constrangimento adicional de área de superfície, considere-se o exemplo Arco de Ponte da figura 4.22b. Pretende-se que a área de superfície da microestrutura do material por unidade de volume (considera-se uma célula unitária, $|Y|=1$), $g_1(\mu)$, satisfaça um valor mínimo, $g_1'(\rho)$, que é uma função da densidade macroscópica, ρ . Em (2.84) o constrangimento é do tipo menor ou igual, mas facilmente se converte em desigualdade de maior ou igual multiplicando ambos os membros por -1 . Assume-se, neste exemplo, que $g_1'(\rho)$ é uma função quadrática dada por (4.1).

$$g_1'(\rho) = \beta(\rho - \rho_{\min})(\rho_{\max} - \rho) \quad (4.1)$$

Nesta equação o factor multiplicativo β foi escolhido de modo a que $g_1'(\rho = 0.5)$ seja cinco vezes superior ao valor da superfície do laminado da figura 4.24 (ver elementos E2 e E3) que corresponde à solução não constrangida. Pretende-se desta forma fazer com que o constrangimento de superfície esteja activo no óptimo e que altere de forma perceptível a topologia da solução não constrangida. No entanto, a função do requisito g_1' permite ainda que se obtenham soluções de vazio ($\rho = 0$) ou material cheio ($\rho = 1$) pois para estas duas situações extremas o valor mínimo da área de superfície exigida é um valor nulo. Para valores

intermédios desta densidade fica definido um material celular de densidade ρ e com uma densidade de superfície mínima garantida.

De acordo com o resultado de (2.100) na secção 2.6, o requisito $g_1'(\rho)$ influi na sensibilidade da função objectivo global. Observando que o MMA efectua minimização de funções e que o constrangimento de área de superfície é uma desigualdade do tipo maior ou igual, vem que:

$$\left\langle \frac{\partial F(\rho)}{\partial \rho}, \delta \rho \right\rangle = \int_{\Omega} \left[-\lambda_1 + \lambda_2 \frac{\partial g_1'(\rho)}{\partial \rho} \right] \delta \rho d\Omega \quad (4.2)$$

A figura 4.34 apresenta as distribuições de densidade obtidas ao nível macroscópico e microscópico. Uma solução local típica é evidenciada nesta figura. Na figura 4.24 o elemento E3 caracterizava um material laminado enquanto, na figura 4.34, a influência do constrangimento de superfície resulta num engelhamento da superfície do laminado que é consistente com o aumento da superfície exigido. A nível macroscópico poucas diferenças existem relativamente à distribuição anterior não constrangida na superfície. Destaque-se apenas o facto do Arco de Ponte aparecer ligeiramente melhor definido ou reforçado. A satisfação do constrangimento local de superfície no problema de maximização da rigidez implica uma solução sub-ótima comparativamente à situação do problema não constrangido. De facto, a solução ótima apresentada na figura 4.34 corresponde a um valor da *compliance* superior em 8% ao valor obtido para o projecto da figura 4.23 (ver também figura 4.35a).

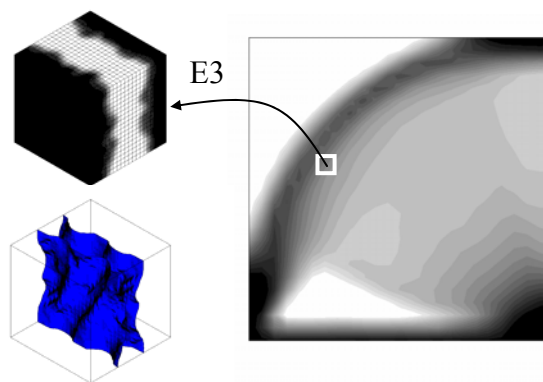


Figura 4.34. Projecto compósito e microestruturas representativas (superfície interior em destaque em baixo) obtidas com introdução de um constrangimento de superfície.

Observe-se que a verificação das condições de ótimo (KKT) implicam agora que a quantidade dada em (4.2) seja constante para $0 < \rho < 1$. Este aspecto está evidenciado na figura 4.35b onde se faz a representação daquela quantidade para os três elementos

seleccionados da figura 4.24. Observa-se uma convergência dos resultados para um mesmo valor constante. As avaliações da superfície $g_1(\mu)$ ao longo das iterações e o valor do requisito $g_1'(\rho)$ mínimo de superfície (recorde-se que $g_1(\mu) \geq g_1'(\rho)$ da secção 2.5.3) constam na figura 4.36 considerando duas microestruturas (dos elementos seleccionados E1 e E2) com valores diferentes de fracção volúmica também representados na mesma figura. Salienta-se o facto da solução inicial satisfazer o constrangimento de volume, mas violar o constrangimento de superfície. No entanto, depois de um número reduzido de iterações iniciais o projecto torna-se admissível devido ao facto dos subproblemas resolvidos pelo MMA introduzirem variáveis artificiais que permitem obter sempre soluções admissíveis dos subproblemas e que, com o passar das iterações, se aproximam “tão perto quanto possível” da admissibilidade do problema original (ver Svanberg, 1987).

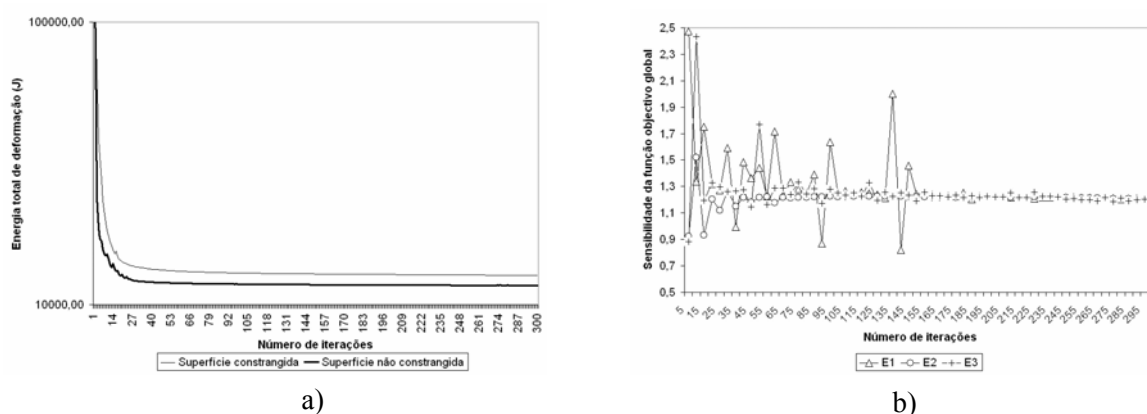


Figura 4.35. História das iterações: a) Função objectivo global (energia total de deformação); b) Sensibilidade da função objectivo global.

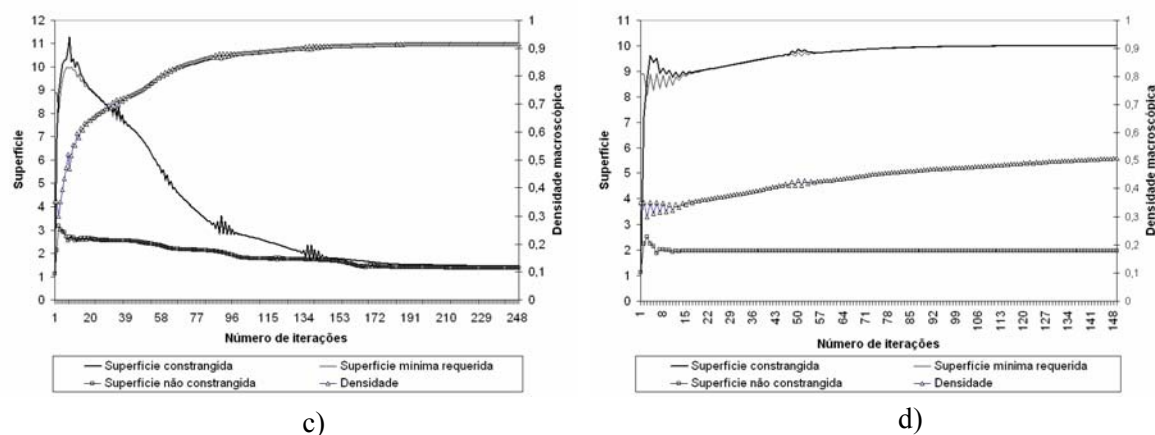


Figura 4.36. História das iterações para o valor da superfície e densidade macroscópica nas microestruturas dos EF seleccionados: a) Microestrutura E1, b) Microestrutura E2.

Outro constrangimento local explorado no âmbito desta dissertação é o constrangimento de permeabilidade. Considere-se o exemplo da figura 4.22a (ou 4.23a) e imponha-se agora um requisito mínimo $g_2'(\rho)$ de permeabilidade na direcção normal ao plano da estrutura. A função da permeabilidade $g_2(\mu)$ é dada neste caso pelo valor da constante de permeabilidade homogeneizada $k_{33}(\mu)$. Sem constrangimento de permeabilidade, a solução compósita da figura 4.23 caracteriza-se por soluções de laminado na maior parte “cinzenta” do domínio, estando as lâminas contidas no plano da estrutura. Este tipo de solução resulta em permeabilidade nula na direcção normal a esse plano. Se um requisito de projecto for a passagem de um fluido através da estrutura nessa direcção, deve ser implementado um constrangimento do tipo $k_{33}(\mu) \geq g_2'(\rho)$. Aqui considera-se um requisito mínimo de permeabilidade dado por (4.3). Esta é uma função linear com a variável de densidade macroscópica que ainda assim permite obter soluções de material cheio para $\rho = 1$ pois não é exigida permeabilidade mínima neste caso de extremo.

$$g_2'(\rho) = -0.325\rho + 0.3 \quad (4.3)$$

Os resultados obtidos com permeabilidade mínima imposta apresentam-se na figura 4.37 em termos da distribuição de densidade macroscópica e nas duas microestruturas indicadas. Observando o resultado macroscópico é digno de nota a influência do constrangimento de permeabilidade no reaparecimento dos raios característicos da solução SIMP mas que não apareciam na solução compósita da figura 4.23a. Em relação às microestruturas, é bem visível o aparecimento de rasgos nas paredes nas soluções tipo laminado ou tubo permitindo assim uma permeabilidade mínima na direcção normal ao plano.

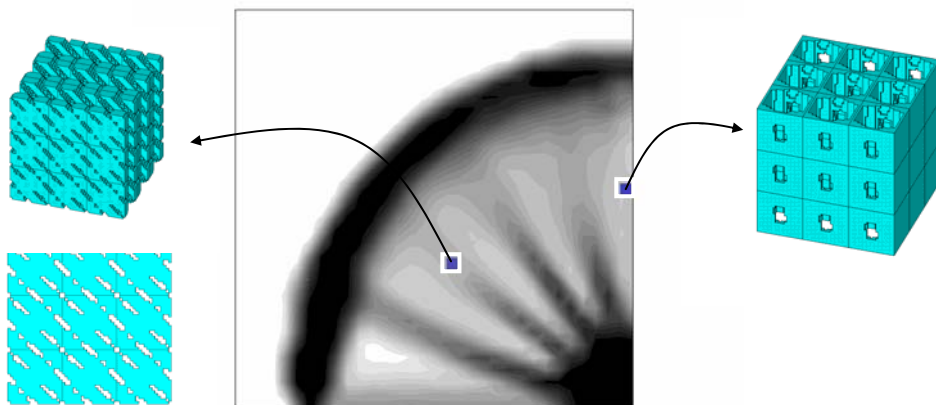


Figura 4.37. Distribuições de densidade macro e microscópica resultantes do projecto com constrangimento de permeabilidade na direcção normal ao plano da estrutura.

Tal como se verificou com a introdução do constrangimento de superfície, o constrangimento de permeabilidade também leva a uma solução sub-ótima em termos de rigidez. Neste caso a *compliance* do problema constrangido (figura 4.37) na permeabilidade é 6% superior ao valor obtido sem esse constrangimento (figura 4.23a).

O exemplo multicarga da figura 4.31 é utilizado agora para mostrar a influência do constrangimento de permeabilidade mínima em qualquer direcção conforme apresentado na secção 2.5.3.2, ou seja, $k_{ii} \geq \kappa$ e $k_{ij, i \neq j} = 0$. Restringindo desta forma as componentes do tensor da permeabilidade \mathbf{K} pretende-se garantir uma permeabilidade ortotrópica ou isotrópica. Neste caso, o requisito mínimo de permeabilidade κ também é dado pela função $g_2'(\rho)$ em (4.3).

A figura 4.38 apresenta o resultado em termos de distribuição da densidade macroscópica. Esta figura apresenta os resultados em forma de desenho explodido semelhante ao da figura 4.32. A influência do constrangimento de permeabilidade é evidente quando se comparam as microestruturas da figura 4.33 com as da figura 4.39. Quando o constrangimento é imposto, o aspecto das microestruturas apresenta-se mais convoluto e tanto mais quanto mais perto da zona de aplicação das cargas.

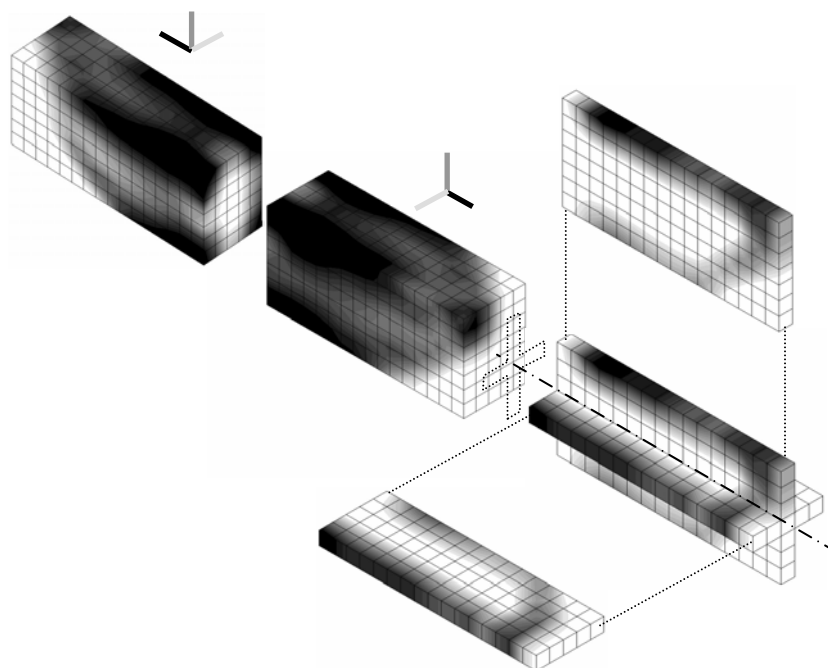


Figura 4.38. Distribuição da densidade macroscópica (média dos valores nodais da densidade).

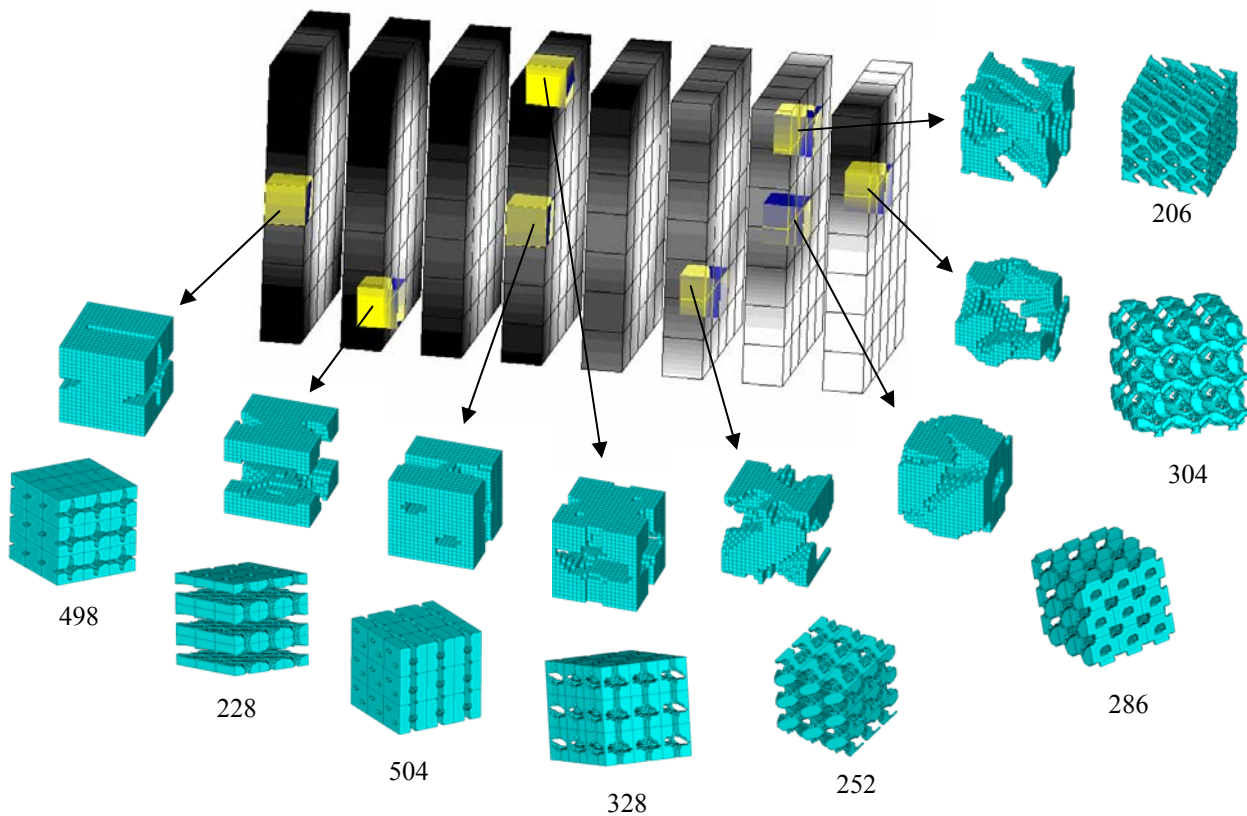


Figura 4.39. Domínio da estrutura fatiado (representação média da densidade macro) com EF-macro seleccionados para representação de algumas microestruturas (representadas células de base e respectivos padrões periódicos).

As microestruturas das figuras 4.33 e 4.39 devem ser comparadas entre si assim como as permeabilidades das tabelas 4.3 e 4.4. Os elementos seleccionados no caso constrangido e não constrangido não são os mesmos porque as distribuições de densidade macroscópica são diferentes. A tabela 4.3 apresenta muitos valores nulos nas componentes do tensor da permeabilidade associados a soluções de laminados conforme apresentado na figura 4.33. Na tabela 4.4 os únicos valores nulos são as componentes fora da diagonal pois foi imposto um valor mínimo para as componentes da diagonal p_{min} (indicado a vermelho). As componentes K_{ij} no mínimo são iguais a p_{min} (os valores mais próximos ou iguais a p_{min} estão indicados a vermelho). Nestas condições não é garantida permeabilidade isotrópica nas microestruturas, porém, fica garantida uma permeabilidade mínima em qualquer direcção espacial nessas microestruturas.

Tabela 4.3. Permeabilidades k_{ij} medidas no problema não constrangido (ver figura 4.33).

Microestrutura	Fracção volúmica	K_{11}	K_{22}	K_{33}	K_{12}	K_{13}	K_{23}
114	0.569	0.367	0	0	0	0	0
208	0.387	0.346	0.346	0.346	-0.173	0.173	0.173
346	0.341	0.607	0	0.607	0	0	0
438	0.560	0.386	0	0.386	0	0	0
500	0.548	0.400	0.400	0	0	0	0
542	0.354	0.592	0.592	0	0	0	0

Tabela 4.4. Permeabilidades k_{ij} medidas no problema constrangido (ver figura 4.39).

Microestrutura	Fracção volúmica	p_{min}	K_{11}	K_{22}	K_{33}	$K_{ij}, i \neq j$
206	0.427	0.161	0.198	0.174	0.196	0
228	0.475	0.145	0.423	0.145	0.416	0
252	0.557	0.119	0.123	0.121	0.173	0
286	0.683	0.078	0.121	0.086	0.085	0
304	0.292	0.205	0.466	0.391	0.373	0
328	0.683	0.078	0.185	0.078	0.196	0
498	0.715	0.068	0.196	0.158	0.068	0
504	0.654	0.087	0.247	0.233	0.087	0

4.3. Comparação de estratégias algorítmicas

Nesta secção utiliza-se o exemplo Arco de Ponte (figura 4.22b, só com constrangimentos de fracção volúmica) para se proceder a uma análise comparativa das quatro estratégias algorítmicas apresentadas na secção 3.2, duas do tipo I (OC e MMA) e duas do tipo II (MMA/OC e MMA/CONLIN). Sobre este assunto vejam-se também os trabalhos de Coelho *et al.* (2007a, 2007b).

O projecto compósito da viga Arco de Ponte obtido através de optimização hierárquica com cada uma das estratégias algorítmicas é apresentado na figura 4.40. Conforme pode ser observado, o *lay-out* da estrutura obtida é basicamente o mesmo independentemente da estratégia utilizada. Os valores finais da função objectivo são muito próximos uns dos outros, ainda assim existem pequenas diferenças, pelo que, se apresentam os projectos da figura 4.40 em valor crescente da função objectivo da esquerda para a direita (ver legenda da figura).

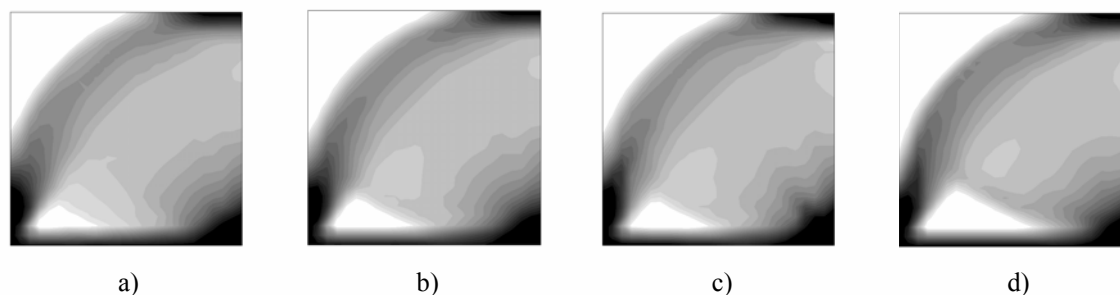


Figura 4.40. Projecto compósito (médias nodais dos valores da densidade macroscópica). Estratégias algorítmicas por ordem crescente do valor da função objectivo (energia total de deformação): a) MMA/OC (11668 J), b) MMA (11698 J), c) MMA/CONLIN (11713 J), d) OC (11718 J)

Analisando os fluxogramas dos algoritmos apresentados nas secções 3.2.1 e 3.2.2, destaca-se a estrutura favorável para processamento paralelo que as estratégias OC, MMA/OC e MMA/CONLIN oferecem. Enquanto estas estratégias permitem identificar o problema de optimização nas variáveis locais como um problema local independente, tal não é possível com a estratégia MMA que considera ao mesmo tempo como variáveis de projecto todas as densidades locais de todo o domínio macroscópico Ω . Este aspecto desfavorece e complica a paralelização do algoritmo. Além disto, em termos de programação esta estratégia exige recursos de memória proibitivos pois conduz a vectores ou matrizes de grande dimensão. Ainda assim, esta estratégia é considerada neste trabalho por motivos de comparação não do tempo de cálculo ou memória requerida, mas da qualidade da solução de projecto final obtida e constitui um estudo de caso do MMA na resolução de problemas de topologia de grande dimensão. Neste caso, o vector das variáveis de projecto, conforme definido na secção 3.2.2.2, é de dimensão $M \times m = 576 \times 8000 = 4608000$ variáveis. O resultado obtido em série com esta estratégia MMA demorou perto de três semanas para completar 200 iterações utilizando um processador Pentium IV.

Na figura 4.41 veja-se o histórico de convergência da função objectivo (*compliance*) num horizonte de 200 iterações. A melhor convergência é obtida com a estratégia hierárquica híbrida MMA/OC. A figura 4.42 apresenta a percentagem de violação do contrangimento de volume global (o projecto inicial verifica o contrangimento de volume). As estratégias que utilizam o MMA apresentam sempre percentagens negativas porque este optimizador, partindo de um projecto inicial admissível, faz a pesquisa de tal modo que a solução obtida em cada iteração está sempre dentro da região admissível. As estratégias MMA/OC e MMA/CONLIN conseguem percentagens negativas ainda menores porque utilizam passos

muito curtos na passagem de um ponto para outro no espaço de projecto. Estas estratégias fazem assim uma pesquisa mais junto da fronteira definida pela função do constrangimento de volume global.

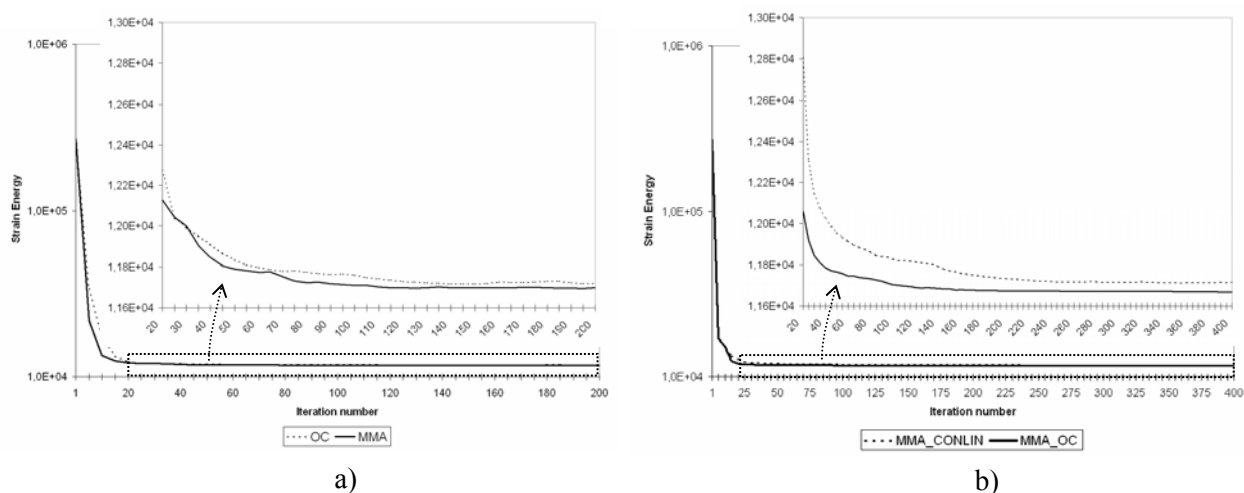


Figura 4.41. Histórico da função objectivo (energia total de deformação, *strain energy*) para as estratégias algorítmicas: a) Tipo I: OC e MMA; b) Tipo II: MMA/OC e MMA/CONLIN.

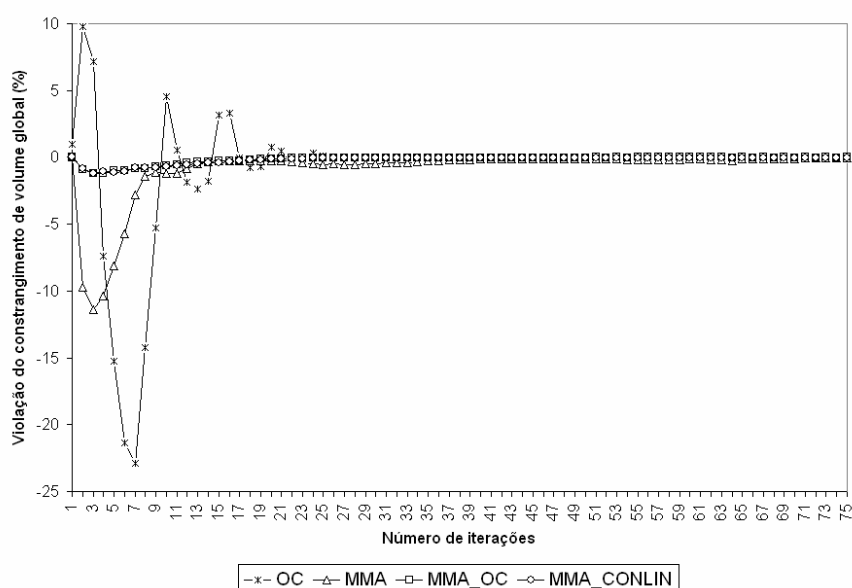


Figura 4.42. Histórico da violação do constrangimento de volume global.

A estratégia com o OC apresenta uma convergência muito dependente dos parâmetros iniciais c , ζ e A_0 definidos em 3.2.1.1. Estes parâmetros precisam de ser escolhidos criteriosamente (afinados) pelo utilizador e por isso é necessário ganhar experiência correndo o algoritmo várias vezes para o mesmo problema. Isto torna o algoritmo dependente do problema e esta é claramente uma desvantagem deste método. As estratégias MMA,

MMA/OC e MMA/MMA, não tendo este tipo de parâmetros de difícil “afinação”, tornam o algoritmo mais independente do problema a ser resolvido.

De um ponto vista prático, as estratégias tipo I são menos interessantes. Por um lado, a estratégia OC é dependente do problema através da definição de valores para parâmetros e não melhora tanto o valor da função objectivo como as outras estratégias. Por outro lado, a estratégia MMA perde características de fácil paralelização ficando assim limitada a problemas de reduzida dimensão. As estratégias do tipo II são menos dependentes do problema a resolver e aproveitam melhor a característica de separabilidade dos problemas locais que é aliciante para uma implementação em paralelo. Além disso, estas estratégias apresentam maior potencial de aplicação a problemas mais complexos dado explorarem melhor a natureza hierárquica do problema de optimização. Quando se trata de introduzir constrangimentos de projecto locais as estratégias tipo II mais facilmente lidam com isso do que as estratégias tipo I. No entanto, tipicamente, as estratégias tipo II convergem mais lentamente do que as estratégias tipo I.

4.4. Escalabilidade do problema hierárquico

Estudos de escalabilidade do problema de optimização hierárquico foram apresentados em Coelho *et al.* (2008a, 2009a). O exemplo da viga Arco de Ponte, com as condições de apoio mostradas na figura 4.22b, é utilizado nesta secção para efectuar um estudo da escalabilidade do problema de optimização simultânea da estrutura e do material. Consideram-se para tal duas malhas distintas: $16 \times 16 \times 1$ (256 EF com total de 1734 graus de liberdade) e $24 \times 24 \times 1$ (576 EF com total de 27783 graus de liberdade). O algoritmo MMA/CONLIN é executado ao longo de 150 iterações. A distribuição de densidade macroscópica e algumas microestruturas obtidas são apresentadas nas figuras 4.43 e 4.44.

O exemplo da viga Arco de Ponte é executado em paralelo várias vezes, utilizando-se de cada vez um número diferente de processadores em intervalos de 16, ou seja, 1, 16, 32, 48, etc. As duas malhas globais consideradas diferem entre si em termos do número de EF por um factor de 2.25 ($=576/256$). Isto permite compreender como a escalabilidade em problemas de optimização hierárquica é sensível ao número de problemas locais por processador. Curvas resultantes do cálculo paralelo sobre as medidas de desempenho: aceleração (*speed-up*),

eficiência e tempo de execução (medido em relógio de parede) são apresentadas na figura 4.45.

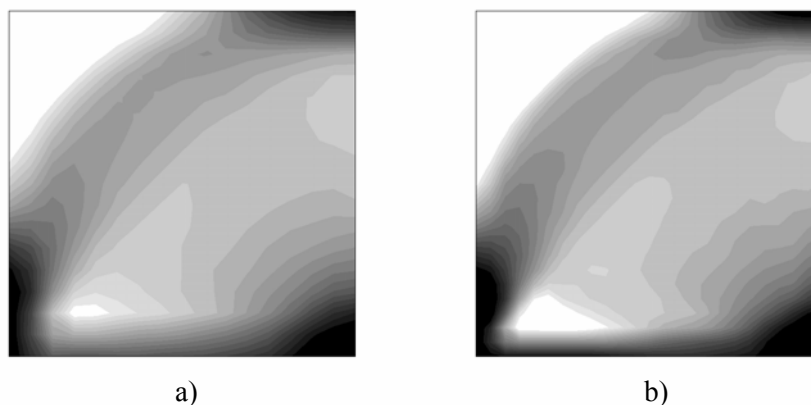


Figura 4.43. Distribuição de densidade macroscópica. Malhas: a) $16 \times 16 \times 1$, b) $24 \times 24 \times 1$.

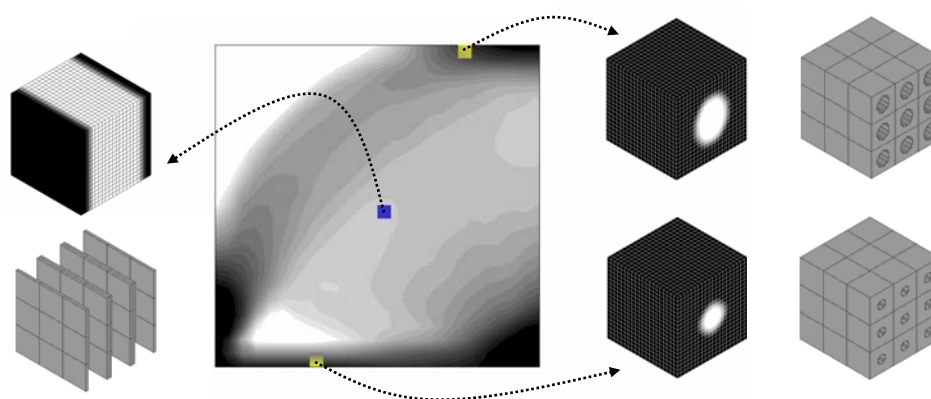


Figure 4.44. Microestruturas obtidas nos EF seleccionados (malha global: $24 \times 24 \times 1$).

Analisando as medidas de desempenho representadas graficamente na figura 4.45, observa-se que as curvas de aceleração e eficiência diminuem à medida que o número de processadores aumenta (até 192). Idealmente, a aceleração seria igual ao número de processadores utilizado (ver recta a traço interrompido na figura 4.45). No entanto, devido a custos de comunicação, *bottlenecks* sequenciais e tarefas computacionais requeridas por uma implementação em paralelo (aquelas que não existem em série), a aceleração usualmente é inferior ao número de processadores. De facto, conforme apresentado no fluxograma da figura 3.8, existe uma parte do programa que não está paralelizada (problema global é executado em série) e isto contribui sem dúvida para uma perda de aceleração. Ademais, a necessidade por sincronismo entre todos os processadores implica que um processador depois de cumprir a sua tarefa de cálculo tem que esperar pelo processador mais “atrasado”, ou seja, aquele que tem mais carga de cálculo para efectuar. Isto impõe sempre, mais ou menos, tempos de espera em

N-1 processadores. Mesmo que todos os processadores tenham que resolver número igual de problemas locais ($M/N=\text{inteiro}$), os tempos de execução de conjuntos desses problemas pode diferir de processador para processador pois a solução numérica dos problemas locais pelo método EBE-PCG pode implicar um número diferente de iterações de problema para problema.

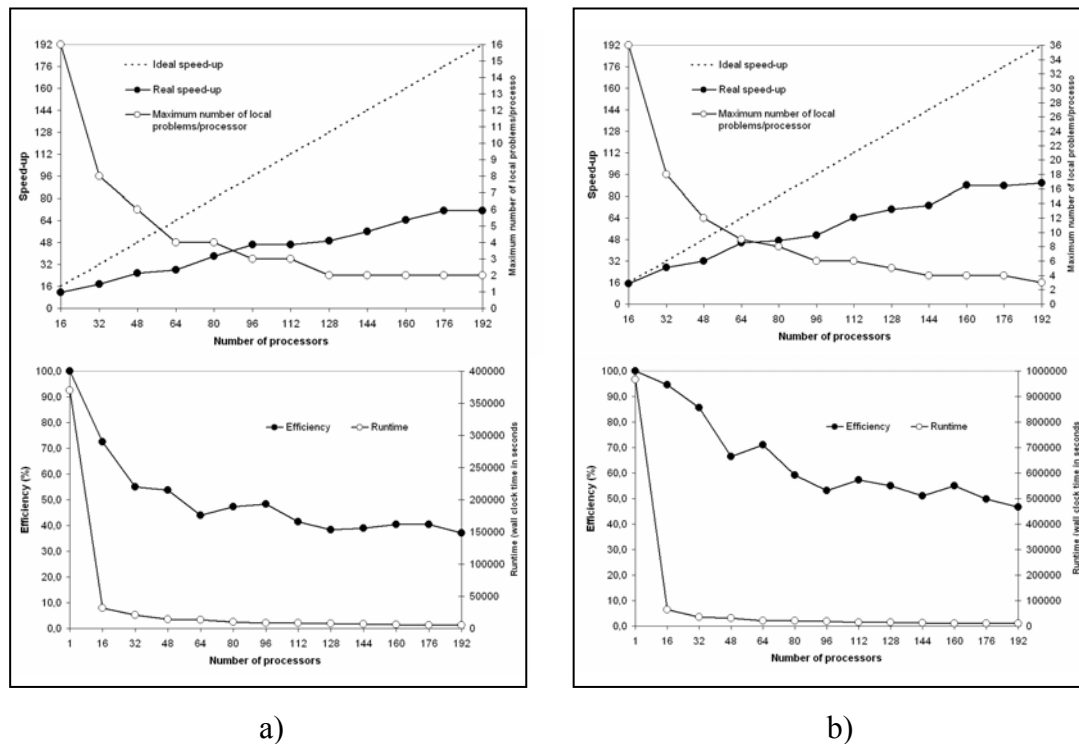


Figure 4.45. Análise de desempenho em cálculo paralelo do problema de otimização hierárquica.

Exemplo Arco de Ponte considerando duas malhas de diferentes resoluções: a) $16 \times 16 \times 1$; b) $24 \times 24 \times 1$ (extraído de Coelho *et al.*, 2009a).

A perda de performance observada nos gráficos da figura 4.45 é suave. Isto evidencia a boa escalabilidade do problema de otimização hierárquica, que para um número já muito elevado de processadores (mais do que 100) ainda apresenta ganhos de performance. De facto, conforme visto no capítulo 2, a formulação hierárquica (2.83) e (2.84) mostra que o problema está paralelizado por natureza. Os problemas locais relacionados com o projecto do material são independentes uns dos outros, pelo que, podem ser resolvidos em paralelo por cada iteração no problema global. As comunicações entre processadores através da rede são apenas necessárias entre iterações globais. À medida que o número de processadores aumenta, a escalabilidade do problema apenas parece ter a tendência de estagnar quando o número máximo de problemas locais por processador se reduz para dois ou três conforme observado

nos gráficos da figura 4.45 referentes ao exemplo considerado. Um problema com um número maior de problemas locais para resolver (e.g. 576) apresenta uma melhor performance do que outro com menos desses problemas (e.g. 256), ver comparação efectuada na figura 4.46.

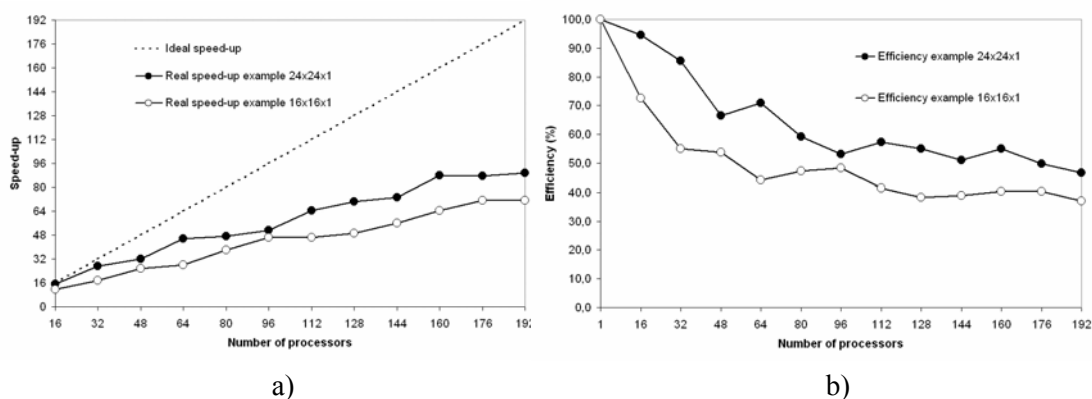


Figure 4.46. Medidas de aceleração e eficiência para o problema “Arco de Ponte” comparando resultados obtidos com duas malhas distintas. a) Aceleração; b) Eficiência (extraído de Coelho *et al.*, 2009a).

Capítulo 5

Modelo Hierárquico de Remodelação Óssea

Ao contrário das estruturas mecânicas fabricadas pelo homem, o osso é uma estrutura viva em permanente processo de adaptação. Esta adaptação depende, entre outros factores, das solicitações mecânicas a que o osso está sujeito e é particularmente incidente no tecido trabecular, mais abundante nas vértebras e nas extremidades dos ossos longos do corpo humano.

O presente capítulo tem como objectivo contribuir para um aprofundar do conhecimento sobre o processo de adaptação natural do osso. Para tal, o modelo hierárquico de optimização apresentado e aplicado a estruturas mecânicas nas secções anteriores é agora explorado para a concretização daquele objectivo. À primeira vista, pelo menos dois factores sugerem a aplicação deste modelo de optimização ao osso. Por um lado, o osso é um material hierárquico, por outro lado, manifesta uma estrutura interna bem adaptada ao ambiente mecânico envolvente. No entanto, conforme se verá à frente nesta dissertação, o critério de máxima eficiência mecânica para o mínimo da massa utilizada não é suficiente para descrever a estrutura do osso e, portanto, é necessário levar em conta no modelo de remodelação outros factores, nomeadamente de cariz biológico.

A parte inicial deste capítulo, secção 5.1, é dedicada a uma contextualização biológica. A secção 5.2 apresenta uma nota histórica sobre as contribuições para o estudo da remodelação óssea que têm surgido ao longo dos tempos. Faz-se uma descrição sucinta dos modelos de remodelação óssea mais recentes, desde 1960 até à actualidade. Na secção 5.3 é apresentado o

modelo de remodelação óssea proposto no âmbito desta dissertação levando em conta algumas características biológicas como a anisotropia, porosidade, área de superfície de osso e permeabilidade intertrabecular.

5.1. Fundamentos biológicos

5.1.1. O esqueleto humano

O esqueleto humano adulto é formado por 206 ossos e numerosos tipos de articulações que os unem entre si, permitindo realizar uma considerável variedade de movimentos. O osso fémur é o mais comprido. Numa pessoa com 1.80m de altura este osso tem cerca de 50cm de comprimento. O osso estribo situado no ouvido médio é o osso mais pequeno medindo apenas 2.5mm. Os ossos do esqueleto humano podem ser classificados quanto à forma como (ver cores na figura 5.1a): longos (legenda verde, *e.g.*, fémur, úmero, rádio, ulna), pequenos (legenda vermelha, *e.g.*, tarso, carpo, patela), planos (legenda azul, *e.g.*, escápula, crânio, costela, esterno) e irregulares (legenda amarela, *e.g.*, vértebra, pélvis, mandíbula).

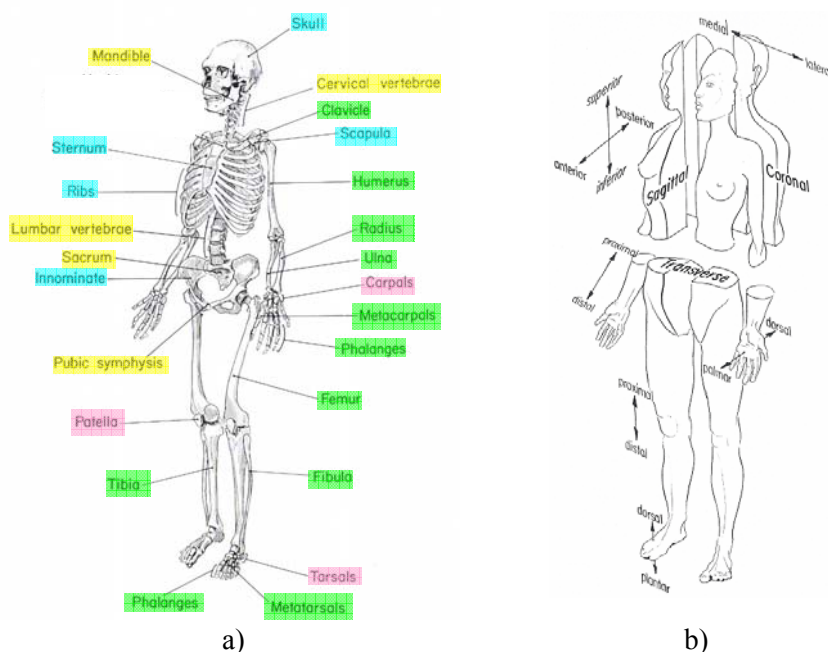


Figure 5.1. O corpo humano. a) Esqueleto com legenda de classificação dos ossos quanto à forma: longos (verde), pequenos (vermelho), planos (azul) e irregulares (amarelo); b) Planos e direcções anatómicas (extraído de Shipman *et al.*, 1985).

O esqueleto humano alcança a maturidade aos 25 anos de idade, e durante toda a vida, desempenha as seguintes funções: suporte (evita o colapso dos tecidos moles do corpo), defesa (oferece protecção contra forças exteriores aplicadas, absorve forças de impacto ou de choque), movimento (ossos comportam-se mecanicamente como alavancas accionadas pelos músculos) e metabólica (a medula óssea presente nos ossos é a fábrica das células do sangue, os ossos também são reservatórios de cálcio e fosfato).

Dado que os pormenores do corpo humano (como os ossos) mudam enormemente segundo a perspectiva com que são observados, para indicar “de que é” que se está a falar e em que direcção se observa, é costume adoptar uma terminologia concreta. Sendo assim, considerando o corpo humano em posição erguida, com os braços esticados ao longo do corpo, este é dividido em diferentes regiões por planos imaginários (planos anatómicos) perpendiculares entre si. Os **planos sagitais** dividem o corpo verticalmente em duas partes direita e esquerda; um só destes planos divide o corpo em duas metades mais ou menos simétricas. Os **planos frontais ou coronais** dividem o corpo verticalmente, mas são perpendiculares aos planos sagitais; estes limitam duas partes: anterior ou ventral e posterior ou dorsal. Os **planos transversais** são horizontais e perpendiculares aos outros dois tipos de plano; dividem o corpo em duas partes: superior ou cranial e inferior ou caudal. A fim de facilitar as descrições anatómicas não só se definem estes planos (anatómicos) mas também direcções anatómicas: anterior-posterior, medial-lateral e inferior-superior (ver figura 5.1b).

5.1.2. Composição e estrutura do osso

O tecido ósseo apresenta porosidade interna e externa (Cowin, 1999). No interior do tecido ósseo são reconhecidos três tipos de porosidade: vascular, lacunar-canicular e colagénico mineral. No exterior do tecido ósseo a porosidade é intertrabecular. Dependendo fundamentalmente do nível de porosidade assim o tecido ósseo é classificado basicamente em dois tipos: **osso trabecular** e **osso cortical**.

O primeiro tipo tem o aspecto de uma esponja daí que seja designado também de osso **esponjoso**. Ao nível macroscópico, o osso trabecular apresenta um arranjo do material semelhante a placas perfuradas ou pequenas barras (trabéculas, espessura até 200µm) ligadas entre si. As trabéculas ósseas delimitam cavidades interconectadas. O tecido trabecular constitui cerca de 20% do total de tecido ósseo no corpo. A porosidade deste tipo de osso é moderada a elevada, ou seja, 30 a 90%. Esta porosidade está associada ao espaço

intertrabecular. No organismo vivo, os poros do osso trabecular estão interconectados e preenchidos essencialmente com medula. A sua localização identifica-se essencialmente com o interior das vértebras e extremidades dos ossos longos. O segundo tipo de osso tem um aspecto denso daí que seja também designado de **osso compacto**. Neste caso a porosidade é mais baixa, ou seja, 5 a 30%. Este constitui cerca de 80% do total de tecido ósseo no corpo. Tipicamente, o osso compacto está associado ao invólucro ou camada periférica dos ossos e apresenta-se como se fosse uma “parede exterior”.

O tecido ósseo é composto por uma parte celular e por uma matriz extra-celular. A organização desta matriz difere entre os tecidos ósseos trabecular e cortical devido basicamente à forma como se processa a irrigação sanguínea do osso, ou seja, a vascularização¹ (ver figura 5.2).

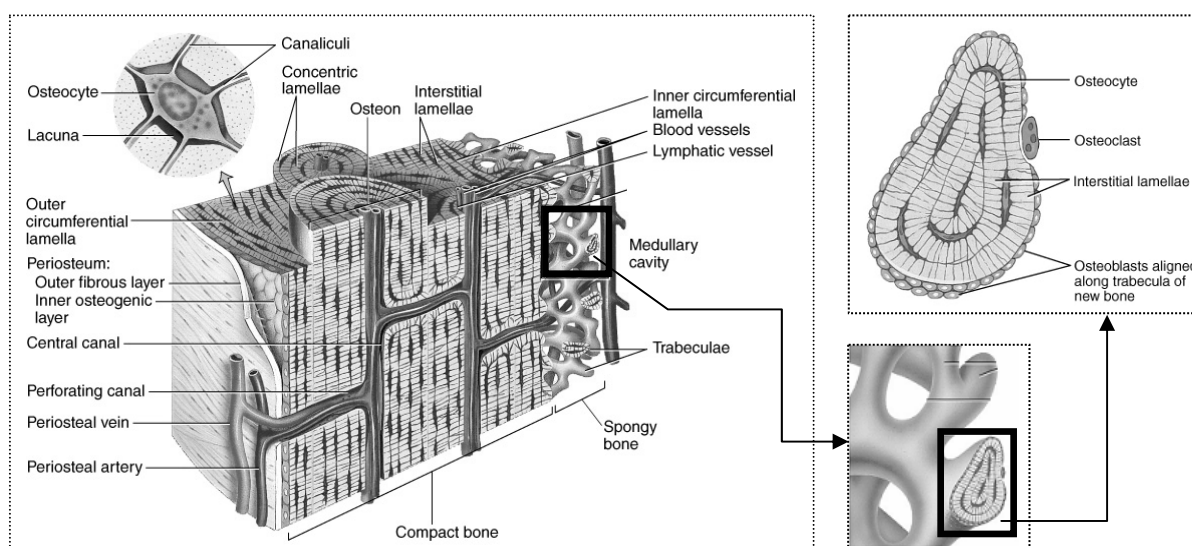


Figura 5.2. Caracterização da matriz óssea nos dois tipos de tecido ósseo, cortical e trabecular².

No caso do tecido ósseo cortical a vascularidade é feita no interior (matriz) do osso através dos canais Haversianos e de Volkman. Os canais de Havers estão aproximadamente alinhados com o eixo longitudinal do osso, contêm capilares e nervos, e têm aproximadamente 50µm de diâmetro (aproximadamente o diâmetro de um fio de cabelo humano). Estes canais surgem no centro de uma formação concêntrica de lamelas chamada de osteões. Os canais de Volkman são pequenos e transversais permitindo assim a ligação dos canais de Havers entre si e com a superfície exterior do osso. Estes canais também contêm vasos sanguíneos e provavelmente

¹ Curiosidade: a distância máxima a que uma célula está de um vaso sanguíneo é 150µm para poder ser alimentada.

² Figuras disponíveis na Internet.

nervos. No interior do tecido ósseo (matriz óssea) podem ser reconhecidos três tipos de porosidade: vascular (canais de Havers e Volkman), lacunar-canicular ($0.1\mu\text{m}$) e colagêneo mineral ($\ll 0.1\mu\text{m}$).

No caso do tecido ósseo trabecular a vascularização é feita pelo exterior, ou seja, através do espaço intertrabecular. Os poros no espaço intertrabecular têm uma dimensão variável, fortemente dependente da zona anatômica. Zonas menos solicitadas mecanicamente são menos densas enquanto zonas mais solicitadas são mais densas. As dimensões dos poros podem variar entre 0.1mm a 1mm . A porosidade trabecular não serve apenas um propósito de eficiência estrutural como se o osso fosse apenas uma relação otimizada entre massa e rigidez. Esta porosidade serve também o requisito biológico de vascularização, ou seja, fornecer oxigênio e nutrientes às células e remover os produtos metabólicos, e também para alojamento de medula. A espessura reduzida da trabécula não permite a formação de osteões na matriz óssea. No interior da trabécula não existe porosidade vascular, a estrutura lamelar revela-se menos organizada e nela estão embebidas as células do osso.

Mais detalhadamente, a matriz óssea extracelular é uma substância do tecido ósseo formada por lacunas onde se situam os osteócitos, constituída por uma parte inorgânica (60%) e outra parte orgânica (40%). A parte inorgânica é principalmente constituída por íons de cálcio e fosfato (cristais de hidroxiapatite), mas podem encontrar-se também íons de potássio, magnésio, citrato, sódio e bicarbonato. Os cristais de hidroxiapatite proporcionam rigidez ao osso sendo determinantes na resistência à compressão. A parte orgânica da matriz é constituída por água (10%) e por uma grande quantidade de fibras colagêneas de tipo I (29%) e proteínas não colagênicas (1%). O colagêneo é determinante na flexibilidade e resistência à tracção enquanto a água serve uma função metabólica de transporte.

Na parte celular existem quatro tipos de células distintas: células de superfície (*lining cells*), osteócitos, osteoblastos e osteoclastos.

Os osteoblastos derivam das células de superfície e são responsáveis pela deposição ou formação de osso, ou seja, são responsáveis pela produção da parte orgânica da matriz (colágeno tipo I, proteoglicanas e glicoproteínas). Os osteoblastos concentram fosfato de cálcio e participam na mineralização óssea.

Os osteoclastos são células gigantes, intensamente ramificadas. Estas são células destruidoras de osso (absorção de osso), digerindo a matriz óssea e dissolvendo os cristais de sais de cálcio (“digestão enzimática”).

As células de superfície são assim designadas por revestirem as superfícies dos ossos, exteriores e interiores (*e.g.*, paredes dos canais Haversianos do osso). Estas células são consideradas osteoblastos equiescentes.

Os osteócitos constituem a maioria da população celular óssea e derivam dos osteoblastos. Encontram-se embebidos na matriz extracelular ocupando lacunas que comunicam entre si através de pequenos canais (canículos). Estas células actuam como sensores mecânicos (mecano-sensores) desencadeando assim o processo de remodelação óssea. A comunicação em rede dos osteócitos é essencial para a manutenção da matriz óssea. Quando esta célula morre há reabsorção da matriz.

O osso pode ser ainda classificado quanto à sua composição e estrutura como um material compósito e hierárquico. Por um lado, o osso é um material compósito uma vez que apresenta uma matriz não homogénea. No caso do osso trabecular podem ser distinguidas duas fases: trabéculas e espaço intertrabecular (poros). Este espaço *in vivo* está preenchido com medula e árvore vascular. Por outro lado, o osso é um material hierárquico porque a sua estrutura apresenta vários níveis de organização dependendo da escala de observação (a microestrutura ainda é um material com microestrutura).

Lucchinetti (2001) apresenta sete níveis hierárquicos para o osso que estão listados em seguida por ordem decrescente da escala de observação que pode ir desde as dezenas de centímetros às centenas de nanómetros:

- Nível 7: Osso inteiro (cm)
- Nível 6: Osso trabecular *versus* compacto (mm)
- Nível 5: Osteões (μm)
- Nível 4: Padrões tridimensionais de fibras de colagénio mineralizadas (μm)
- Nível 3: Arranjo em paralelo de fibras de colagénio mineralizadas (nm)
- Nível 2: Fibrilas de colagénio mineralizada (nm)
- Nível 1: Constituintes básicos. Colagénios e cristais de hidroxiapatite (nm)

O modelo hierárquico de remodelação óssea apresentado à frente na secção 5.3 aplica-se aos dois níveis de topo, 6 e 7. O nível 7 (escala macroscópica conforme referido em diante) tem como dimensão característica as dezenas de centímetros. A dimensão característica para o nível 6 (escala microscópica conforme referido em diante) é da ordem das décimas de milímetro o que permite caracterizar a arquitectura trabecular e o espaço intertrabecular.

Para mais detalhes sobre este tópico recomenda-se a consulta das obras de Cowin (2001), Martin *et al.* (1998) e Currey (2002).

5.1.3. O osso fémur

Esta secção é dedicada em particular à descrição do osso fémur pois este constitui a aplicação do modelo de remodelação óssea conforme apresentado no capítulo 6 desta dissertação. O fémur, ou osso da coxa, é o osso mais comprido e pesado do corpo humano. Medindo cerca de 50 cm no homem adulto, o fémur corresponde aproximadamente a um quarto da altura total do indivíduo. Tem um corpo longo (ou diáfise) e espesso com duas extremidades expandidas (ou epífises). A metáfise é a parte do osso que cresce entre a diáfise e epífise. A extremidade superior articula-se com a bacia para formar a articulação da anca, e a extremidade inferior articula-se com a tíbia e rótula para formar a articulação do joelho (ver figura 5.3).

A **extremidade superior** inclui: (1) Cabeça – é a eminência quase esférica que constitui o “macho” da enartrose da anca; (2) Colo – é a zona mais estreita que liga a cabeça e o corpo do fémur; (3) Grande e pequeno trocânter – eminências ósseas que possibilitam a inserção dos músculos. O longo **corpo central** do fémur é ligeiramente encurvado, sendo côncavo na sua face posterior. Em grande parte da sua extensão, o fémur apresenta-se cilíndrico, com uma secção circular, ou seja, um tubo constituído por osso compacto, forte e denso. Esta camada de osso compacto encerra um núcleo de medula óssea amarela que, nos adultos, é constituída por células adiposas. A **extremidade inferior** do fémur é constituída por duas apófises ósseas expandidas, os côndilos femorais interno e externo. Estes apresentam superfícies lisas e curvas que se articulam com a tíbia e a rótula para formar a articulação do joelho. O contorno dos côndilos femorais é visível quando a perna se apresenta com o joelho flectido.

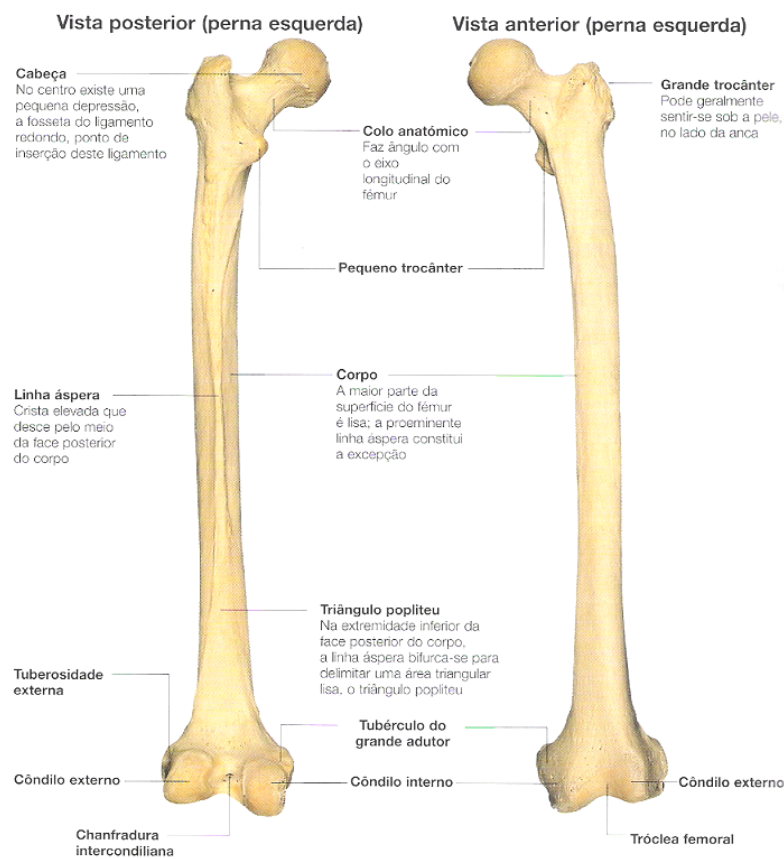


Figura 5.3. Vistas posterior e anterior do fêmur (esquerdo), extraído de Abrahams (2003).

As extremidades expandidas do fêmur (epífeses) são compostas por uma camada superficial de osso compacto que envolve uma área central de osso esponjoso. A figura 5.4 evidencia este aspecto apresentando uma secção frontal do osso fêmur proximal. Esta área central tem uma estrutura muito menos densa e não existe medula nas epífeses. É sobretudo nesta zona do osso que a remodelação óssea é mais incidente e sensível à aplicação das cargas mecânicas exteriores.

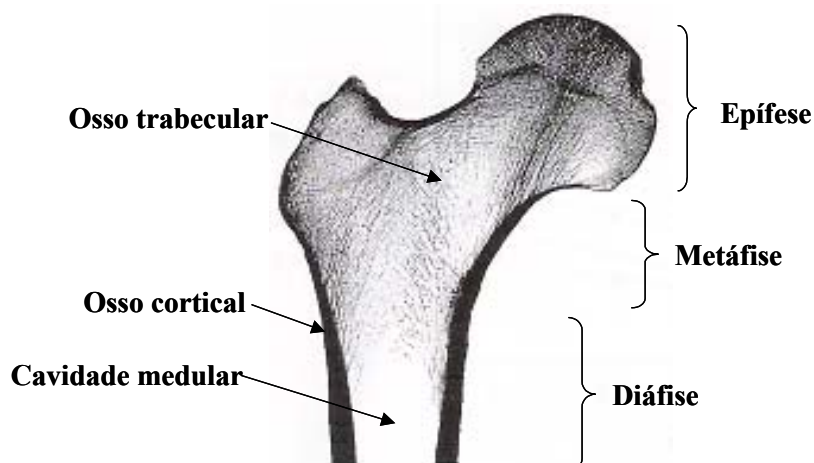


Figura 5.4. Secção frontal do osso fêmur proximal evidenciando os tipos de tecido ósseo.

No caso apresentado na figura 5.4, as zonas da metáfise e da epífise são zonas muito solicitadas mecanicamente devido à proximidade da articulação da anca que obriga o fêmur a suportar basicamente uma carga vertical no sentido da força da gravidade. A articulação da anca ao contrário, por exemplo, da articulação do ombro, é uma articulação que trabalha sempre a “favor” da gravidade o que lhe confere mais estabilidade. Outras forças mecânicas a que o fêmur está sujeito são provenientes das ligações musculares. A superfície do fêmur é acidentada por eminências às quais os músculos se ligam. Estes músculos accionam movimentos das pernas e das ancas (ver figura 5.5).

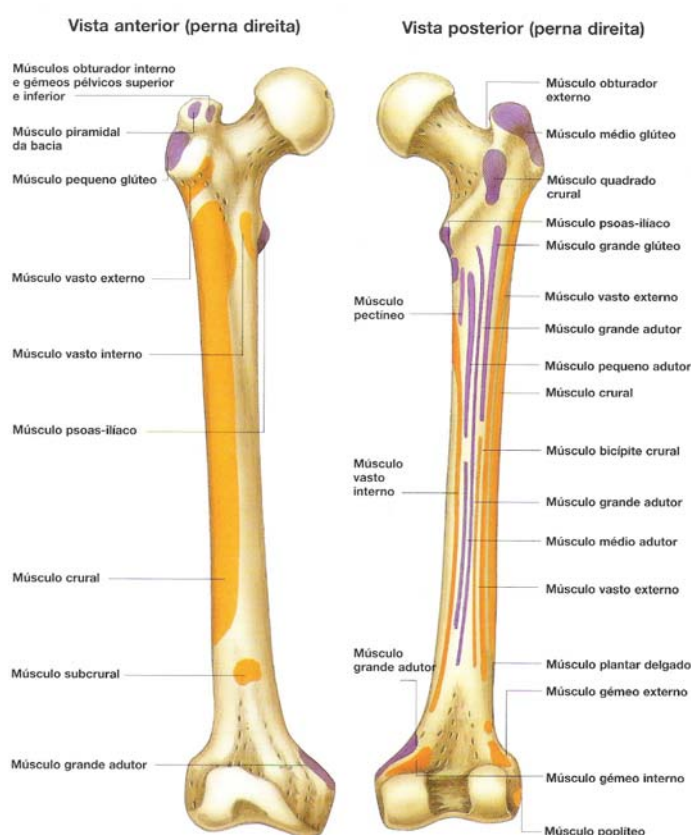


Figura 5.5. Ligações musculares do fêmur (extraído de Abrahams, 2003).

O fêmur é um osso muito forte que oferece pontos de fixação para muitos músculos locomotores da articulação da anca e das pernas. Nos pontos em que o músculo se liga ao osso ocorre uma eminência ou acidente ósseo (apófises ósseas). Se o músculo é forte, ou se vários músculos se ligam no mesmo local, o acidente ósseo pode ser pronunciado. Alguns músculos, têm a sua origem nos ossos da bacia, pelo que cruzam a articulação da anca para se inserirem no fêmur. Quando estes músculos se contraem, fazem com que a anca se mova, levando a perna a flectir-se, endireitar-se ou deslocar-se para o lado (movimentos de abdução

e adução). Outros músculos têm origem no próprio fémur e descem, passando pelo joelho, para se inserirem na tíbia ou no perónio, os dois ossos da parte de baixo da perna. Estes músculos determinam a flexão ou deflexão do joelho. Em conjunto, estes músculos accionam movimentos das pernas como os de escalar ou erguer da posição sentada.

5.1.4. Remodelação óssea

O osso é um tecido biológico bastante dinâmico basicamente devido à actividade combinada ou em separado de dois tipos de células, os osteoblastos e os osteoclastos. Esta dinâmica não é apenas caracterizada pelas grandes transformações morfológicas e dimensionais que ocorrem nos ossos durante as fases de crescimento de um indivíduo – infância, puberdade e adolescência. De facto, esta é a fase de modelação dos ossos caracterizado pelos osteoblastos e osteoclastos actuarem em separado, como se estivessem esculpindo uma estátua tirando material de um lado e colocando noutro para dar uma forma (remodelação externa). Embora o crescimento termine com a chegada à idade adulta o osso continua em estado de permanente remodelação (remodelação interna).

Durante toda a vida de um indivíduo ocorre remodelação óssea interna, isto é, uma actividade celular no interior do osso que pode ter os seguintes efeitos na massa óssea: manutenção, hipertrofia (ganho de massa) e atrofia (perda de massa). Por exemplo, sabe-se que o exercício físico favorece o aumento de massa óssea enquanto a inactividade física, condições de microgravidade ou doença (osteoporose) estão associados a uma perda de massa óssea.

Através da remodelação óssea o osso “velho” é substituído por “novo” em maior ou menor quantidade, microfracturas internas são reparadas e a arquitectura interna na parte trabecular é adaptada às condições de carga a que o osso está exteriormente sujeito. No processo de remodelação óssea os osteoblastos e osteoclastos trabalham em equipa (BMUs – Basic Multicelular Units).

O processo de remodelação interna do osso trabecular é o que tem mais relevância no âmbito desta dissertação. As figuras 5.6 e 5.7 ilustram o processo natural de remodelação ao nível das trabéculas. A figura 5.6 apresenta um gráfico que relaciona a variação de espessura de uma trabécula durante o processo de remodelação ao longo do tempo. Diferentes etapas deste processo podem ser reconhecidas neste gráfico através da

numeração e coloração de diferentes regiões, nomeadamente: Absorção, Reversão e Deposição. Cada uma destas etapas está ilustrada na figura 5.7 onde se apresenta uma amostra de osso trabecular na qual o processo de remodelação óssea se demonstra.

A comunidade científica concorda que o processo de remodelação óssea é activado por um estímulo mecânico local (deformação/tensão) que é medido pelos osteócitos (células que funcionam como mecano-sensores). A variação da massa com este estímulo foi proposta por Frost (1987) através da hipótese de mecanostato. Segundo esta hipótese extensões inferiores a 200μ resultam em perda de massa óssea, valores compreendidos entre 200μ e 1500μ correspondem a manutenção de massa óssea e valores superiores a 1500μ resultam num aumento.

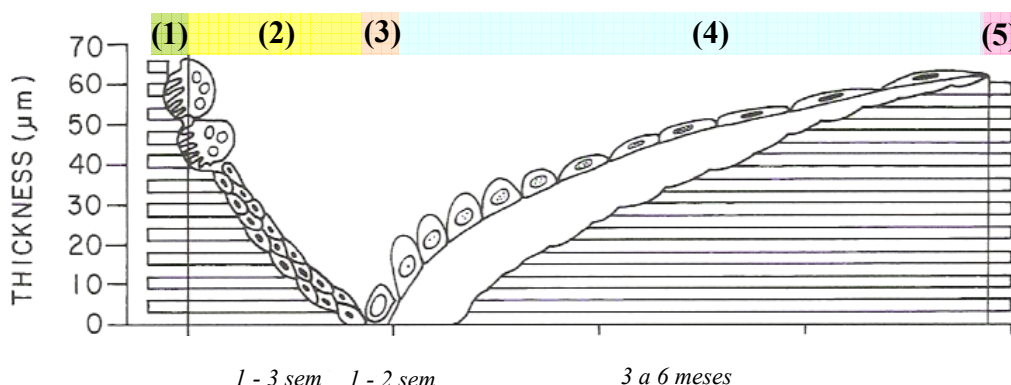


Figura 5.6. Variação da espessura de uma trabécula ao longo do processo de remodelação (extraído de Cowin, 2001).

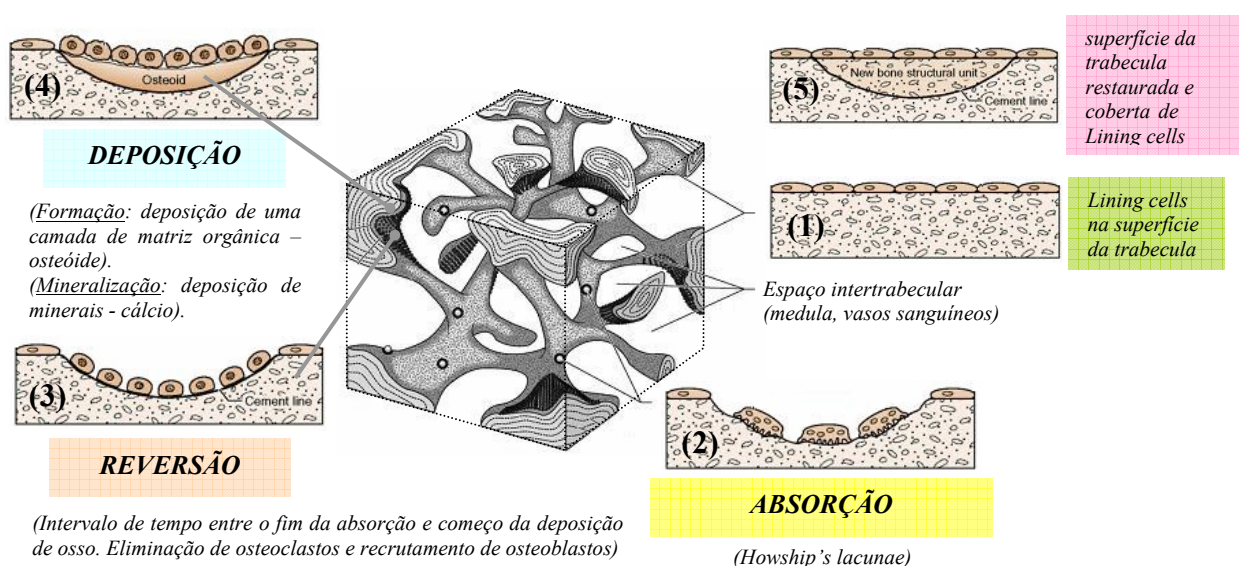


Figura 5.7. Representação esquemática das várias etapas do processo de remodelação numa amostra de osso trabecular.

5.1.5. Osteoporose

O osso é um tecido vivo que está em constante remodelação e o esqueleto é renovado várias vezes ao longo da vida de um indivíduo. A massa óssea atinge o seu pico máximo por volta dos 25 anos de idade. Este nível de massa óssea mantém-se durante cerca de uma dezena de anos e depois segue-se uma inevitável perda de massa óssea progressiva e moderada. No caso do sexo feminino, após a menopausa, esta perda de massa óssea acelera significativamente devido ao défice hormonal, ou seja, a carência de estrogéneos conduz a uma diminuição da actividade osteoblástica. Quando a massa óssea diminui abaixo de um certo nível, fala-se de osteoporose (OP).

A osteoporose é uma doença do esqueleto humano que representa uma diminuição do tecido ósseo e altera progressivamente a estrutura dos ossos. Estes tornam-se cada vez mais porosos e, conseqüentemente, mais frágeis. Assim, as fracturas surgem mais facilmente. Na osteoporose os ossos estão tão frágeis que se podem partir sem um grande trauma. Cair ao nível do solo pode ser suficiente.

Embora uma diminuição da massa óssea seja sempre inevitável com o passar dos anos de vida de uma pessoa, boas práticas de alimentação e actividade física podem ajudar a reforçar o capital ósseo do indivíduo e a desacelerar o processo de perda natural.

A alimentação, em especial o cálcio, tem um papel importante na manutenção de massa óssea. O cálcio fornece ao osso a sua força e solidez, pelo que é necessário ingerir cálcio em quantidades suficientes. Os produtos lácteos (leite, queijo, iogurte, etc) são as melhores fontes de cálcio, bem como algumas águas minerais. A ingestão de proteínas (carne, peixe...) também tem um papel importante na manutenção da integridade do osso. No caso dos indivíduos do sexo feminino, o ideal após a menopausa seria consumir 3 a 4 produtos lácteos por dia. A vitamina D, seja obtida através da alimentação (óleos de peixe, sardinha, salmão, arenque, gema de ovo, manteiga e queijo) ou da exposição aos raios solares (mínimo de 1 hora por dia previne a carência desta vitamina), permite aumentar a absorção do cálcio pelo intestino e favorecer a mineralização do osso.

O exercício físico é importante para a prevenção da osteoporose e das fracturas osteoporóticas. As actividades físicas mais indicadas para prevenir a perda de massa óssea são os desportos ditos “em carga” (aqueles que obrigam um indivíduo a suportar o peso do seu próprio corpo). Para manter os ossos mais robustos, a prática de uma actividade física regular

é indispensável. A marcha (caminhada) é uma boa maneira de lutar contra a osteoporose. Para reforçar o osso é necessário fazer marcha frequentemente, durante o maior tempo possível e no ritmo mais rápido possível. A natação não é uma actividade física adequada para manter a massa óssea. Na água a pessoa suporta só uma pequena parte do peso do seu corpo. Mas por outro lado, o exercício na água, nomeadamente após uma fractura vertebral, pode permitir aliviar as dores, manter a força muscular, ganhar flexibilidade e corrigir posturas incorrectas da coluna.

A massa óssea pode ser medida indirectamente pela avaliação da densidade mineral óssea, através de um exame vulgarmente chamado de densitometria óssea. Este exame ajudará a fazer o diagnóstico de osteoporose mesmo antes de surgir uma fractura osteoporótica. Este método avalia o conteúdo em minerais do osso que são responsáveis por uma grande parte da solidez do osso. Uma densidade mineral óssea baixa implica então uma maior fragilidade do osso.

A osteoporose desenvolve-se de forma silenciosa e é a ocorrência de uma fractura que na maior parte dos casos revela a doença. Por isso, a osteoporose ainda continua a ser uma doença insuficientemente detectada, sendo o número real de mulheres com osteoporose superior aos casos diagnosticados. Hoje em dia, estima-se que uma em cada três mulheres após os 50 anos de idade sofrerá uma fractura osteoporótica, enquanto que uma mulher em cada doze será afectada pelo cancro da mama ao longo da sua vida. Com o aumento da esperança média de vida, observa-se um aumento dos casos de fracturas osteoporóticas. A Organização Mundial de Saúde (OMS) classificou a osteoporose como um dos principais problemas de saúde nos próximos tempos. Dada a relevância do perigo que a osteoporose representa em termos de saúde pública com consequentes intervenções cirúrgicas, torna-se importante também a investigação na área dos implantes ortopédicos e engenharia de tecidos conforme desenvolvido na próxima secção (Tavares *et al.*, 2007; Brown e Josse, 2002). Acrescente-se que, seguindo essa linha de investigação, o modelo de remodelação óssea proposto nesta dissertação pode apresentar futuramente um potencial de aplicação interessante nessas duas áreas, implantes e engenharia de tecidos.

5.1.6. Implantes/Engenharia de tecidos

A “máquina humana” tão complexa e funcional ao mesmo tempo, “avaria-se” de quando em vez. A medicina em primeiro lugar, seguida da cirurgia, e, actualmente, a engenharia

genética, a embriologia e as mais modernas disciplinas tentam remediar a situação. Se bem que as últimas descobertas no campo da genética permitam confiar na possibilidade de reproduzir “em proveta”, a partir de células de cada paciente, os tecidos necessários para um transplante, os planos de substituir as partes deterioradas da “máquina humana” estão a envolver, desde há algum tempo, inúmeros sectores da medicina, da engenharia ou da biotecnologia.

Em poucos anos foram registados avanços significativos tanto no desenvolvimento e utilização de materiais sintéticos cada vez mais ajustados às distintas necessidades cirúrgicas, como na fabricação de instrumentos de dimensões diminutas para incorporar em órgãos defeituosos, na criação de novas técnicas cirúrgicas de reabilitação ou de transplante e ainda na procura de soluções inovadoras. Entre estas, por exemplo, cabe destacar o desenvolvimento de inúmeros órgãos bioartificiais produzidos nas últimas décadas: pele, cartilagens, ossos, ligamentos e tendões semi-sintéticos. Por enquanto, as intervenções mais frequentes continuam a ser “tradicionais”: implantes de dadores compatíveis, emprego de instrumentos mecânicos (*e.g.* articulações artificiais) e próteses que substituem, pelo menos em parte, as “peças” deterioradas do corpo humano (ver figura 5.8).

A maioria dos tratamentos clínicos do tecido ósseo (por motivo de doença, *e.g.* osteoporose, deformações congénitas ou pós-traumáticos) não passíveis de auto-enxerto, envolve a utilização de implantes não biológicos. Estes, são materiais estranhos ao organismo que não respondem a alterações fisiológicas e estímulos bioquímicos e que, embora considerados quase inertes do ponto de vista químico, não o são do ponto de vista biológico e mecânico. Dois exemplos paradigmáticos são os efeitos de “stress-shielding” em redor das próteses mecânicas e a consequente atrofia do osso adjacente, e a resposta inflamatória precedente ao descolamento asséptico deste tipo de próteses, devido às partículas de desgaste libertadas no organismo (Bauer e Schils, 1999). Acresce a este facto, que a revisão de próteses é em geral um procedimento cirúrgico complexo, com riscos elevados para o paciente. Os implantes temporários fabricados em materiais bio-solúveis resolvem alguns dos problemas associados aos implantes permanentes mas são maioritariamente aplicáveis a suturas ou correcções de pequena dimensão, não sendo igualmente livres de outros problemas como a evolução não reprodutível das propriedades mecânicas com o tempo e aspectos biológicos e químicos relativos à eliminação dos produtos de degradação (Ambrose e Clanton, 2004).

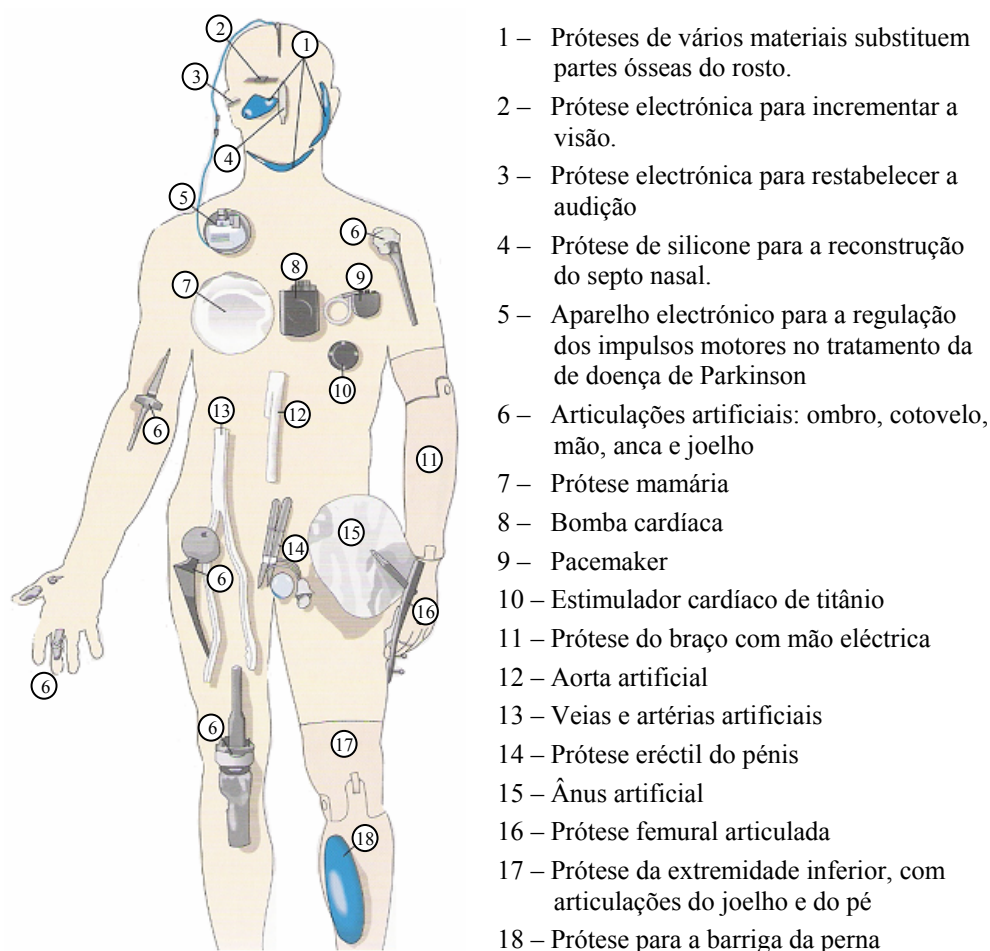


Figura 5.8. O ser humano biónico (Rigutti *et al.*, 2008).

Uma corrente recente em medicina regenerativa - a Engenharia de Tecidos ou Tecedular - tem por objectivo desenvolver substitutos biológicos que restitua a funcionalidade através da introdução de elementos biológicos que sejam integrados pelo organismo (Vacanti e Langer, 1999). Esta envolve a expansão de células em cultura (preferencialmente oriundas do próprio paciente para garantir compatibilidade imunológica) e a sua posterior organização tri-dimensional em tecidos funcionais, biologicamente ajustados ao paciente. Uma vez que as células não possuem a capacidade de se organizar espontaneamente em formas anatómicas, são cultivadas em suportes biomiméticos porosos (*scaffolds*) que actuam como substratos para adesão e posterior proliferação celular. No caso do tecido ósseo, as três funções primordiais de um *scaffold* são:

1. Geométrica – moldar a forma anatómica. O tecido regenerado é o negativo do *scaffold*.

2. Mecânica – suporte resistente permanente ou temporário. No caso ideal o suporte é biosolúvel com uma taxa de solubilização (biodegradação) comparável à de formação de osso permitindo a substituição progressiva do *scaffold* pelo tecido ósseo.
3. Biológica – promover vascularização abundante por forma a estimular/assistir convenientemente o processo de regeneração do tecido.

Tirando partido da tecnologia de micro-tomografia computadorizada (μ -CT), um *scaffold* poderia ser concebido a partir de uma imagem em computador fiel à arquitectura trabecular real do osso. No entanto, entre outras dificuldades, esta aproximação não permite controlar a porosidade/permeabilidade do *scaffold* que se torna crítica para o desempenho biológico (migração das células), ver Lin *et al.* (2004). O projecto de *scaffolds* com base num modelo de optimização de microestruturas não só permite melhorar o desempenho mecânico da estrutura (rigidez), como também controlar a porosidade/permeabilidade enquanto constrangimento de projecto.

Em termos de projecto, as funções mecânica e biológica requeridas para um *scaffold* entram em conflito, ou seja, para melhorar uma função significa piorar-se a outra. Por um lado, *scaffolds* que desempenham bem a sua função biológica tendem a ser porosos para favorecer o intracrescimento ósseo. Os poros necessitam de ter uma dimensão superior a 100 μ m para este fim (Gross e Rodríguez-Lorenzo, 2004). Por outro lado, *scaffolds* para desempenharem bem a sua função mecânica tendem a ser rígidos ou densos. Um compromisso entre os dois requisitos é desejável.

Hollister *et al* (2002) e Lin *et al* (2004) fazem a minimização da norma L_2 do erro entre a rigidez efectiva do *scaffold* (obtido pela repetição periódica no espaço de uma célula de base com simetria ortotrópica) e uma rigidez alvo utilizando constrangimentos na porosidade. A rigidez efectiva é calculada recorrendo à teoria da homogeneização. A rigidez alvo é determinada através de μ -CT a uma parte da arquitectura trabecular e depois cada *voxel* da imagem obtida é convertido num elemento finito. O resultado é um modelo de elementos finitos que sujeito a diferentes condições de carregamento permite calcular algumas constantes elásticas. Normalmente por este processo conseguem-se calcular as nove constantes elásticas do tensor da elasticidade associadas a uma simetria material de ortotropia. Em Hollister *et al* (2002) faz-se também uma optimização multi-objectivo da rigidez para levar em conta duas situações distintas no tempo: instante imediatamente

após a cirurgia (rigidez só é dada pelo *scaffold*) e instante final quando o *scaffold* tiver desaparecido (rigidez só é dada pelo tecido regenerado).

O fabrico de suportes porosos para Engenharia de Tecidos tem sido largamente alicerçado na aplicação de técnicas convencionais de síntese de materiais porosos ou têxtil a materiais biocompatíveis (permanentes) ou biosolúveis (temporários), ver Mikos e Temenhoff (2000). Embora existam inúmeras variantes, estas técnicas baseiam-se essencialmente na geração de poros no interior de uma matriz (e.g. através da lixiviação de partículas com solventes, separação de fases líquidas ou formação de bolhas gasosas) ou na tecelagem ou aglomeração caótica de fibras. Em ambas as situações é manifesta a impossibilidade de controlar de forma precisa a distribuição de poros ou a ligação entre fibras e como tal, assegurar os requisitos geométricos, dimensionais e de interconectividade, essenciais à proliferação celular de forma organizada e conferir propriedades mecânicas adequadas com o grau desejável de anisotropia.

Em virtude da rápida evolução do poder de computação e da automatização dos processos de fabrico em sistemas CAD/CAM observados nas duas últimas décadas, existe hoje um número de processos a serem investigados para o fabrico de *scaffolds* com estruturas internas prescritas. A maioria destes são inspirados em técnicas de prototipagem rápida em particular daquelas classificadas como aditivas (Sachlos e Czernuszka, 2003; Hutmacher et al., 2004). Estas permitem a construção automatizada de formas arbitrárias (directamente de ficheiros digitais) através da adição de material *voxel-a-voxel*, linha-a-linha ou camada-a-camada sem recurso a ferramentas moldantes e como tal, adequadas ao fabrico exclusivo ou personalizado. A versatilidade oferecida pela automatização ao nível do projecto permite a importação de dados radiológicos (e.g. Tomografia Axial Computorizada e Imagem por Ressonância Magnética) determinantes à definição precisa das formas anatómicas a reconstruir (nível 7 da hierarquia do osso, ver secção 5.1.2). A sua natureza aditiva oferece o potencial de controlar a arquitectura interna de substitutos ósseos com uma resolução espacial da ordem das décimas de milímetro (escala do osso trabecular ou nível 6 da hierarquia).

A figura 5.9 ilustra o potencial descrito, apresentando várias formas anatómicas correspondentes aos ossos da mão esquerda de um adulto obtidas por impressão tri-dimensional, após conversão do respectivo ficheiro de tomografia axial computorizada num modelo CAD 3D.

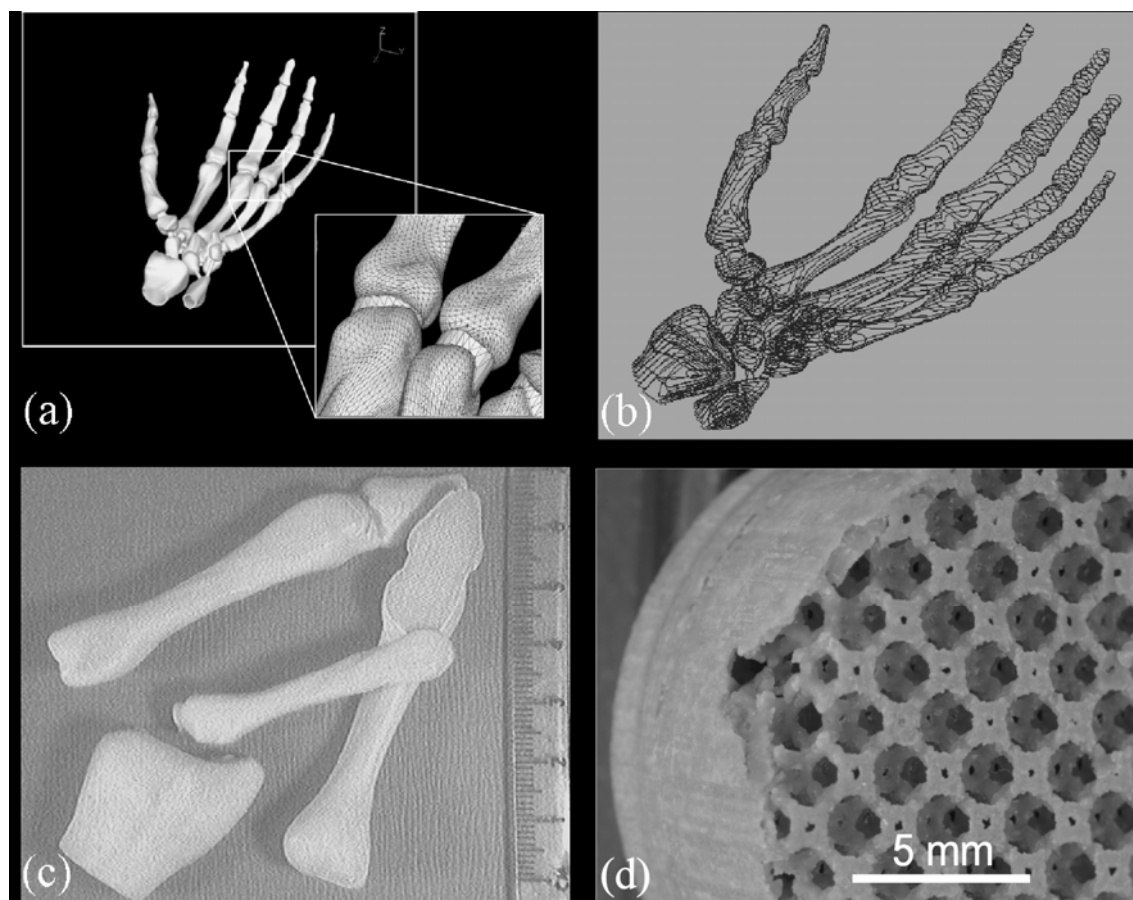


Figura 5.9. a) Modelo sólido resultante da interpolação dos contornos de imagens obtidas por tomografia axial computadorizada (ampliação mostra a aproximação da superfície por facetas triangulares); b) Seccionamento do modelo superficial tendo em vista a construção camada por camada; c) Formas obtidas por impressão 3D; d) Exemplo de uma arquitectura interna com porosidade e interconectividade definidas pela repetição espacial periódica do poliedro de Kelvin (extraído de Coelho *et al.*, 2005).

No que concerne aos outros níveis de hierarquia do osso (níveis 1 a 5, ver secção 5.1.2), igualmente determinantes no sucesso clínico da engenharia tecidual, a sua manipulação depende em larga escala da forma como as células interpretam a informação proveniente dos materiais utilizados, dos factores bioquímicos neles incorporados e dos estímulos mecânicos e de escoamento observados durante o processo de regeneração (Lutolf e Hubbell, 2005). No caso dos suportes biosolúveis, a organização hierárquica dos níveis mais baixos é induzida por um processo de remodelação em tudo semelhante ao que ocorre de forma natural, com a digestão enzimática do suporte sintético e subsequente aposição de nova matriz extracelular precisamente organizada pelas células.

5.2. Modelos de remodelação óssea

5.2.1. Breve nota histórica

Alguns marcos históricos relevantes na compreensão da dinâmica do tecido ósseo humano são referidos em seguida.

Galileo (1638) apontou implicações mecânicas na forma dos ossos.

Bell (1827) e Bourgerie (1832), aparentemente reconheceram que a arquitectura do osso trabecular é influenciada por forças mecânicas. O osso era encarado com rigidez maximizada relativamente ao peso.

Ward (1838) comparou o arranjo trabecular na cabeça de um osso fémur à estrutura reticulada de um candeeiro de iluminação de rua. Argumenta-se que a arquitectura do osso deve seguir bons princípios de engenharia (ver figura 5.10a).

Meyer e Culmann (ver Meyer, 1867) estabelecem uma semelhança entre a orientação das trabéculas na cabeça do fémur e a trajectória das tensões principais na estrutura de uma coluna com extremidade curva (*Fairbain crane*). Sugere-se que as trajectórias das trabéculas encontram-se em ângulos rectos (ver figura 5.10b).

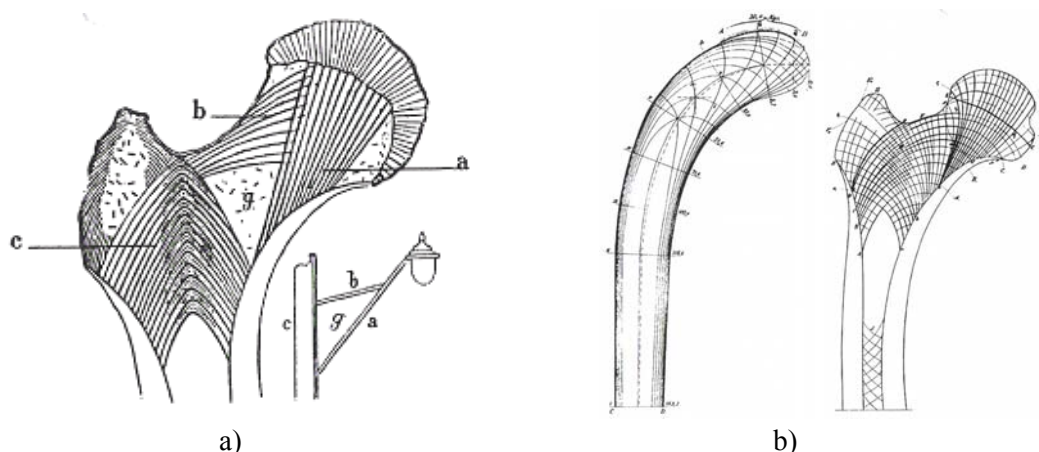


Figura 5.10. a) Analogia de Ward em 1838; b) Analogia de Culmann-Meyer em 1867.

Wolff (1870) aceitou as hipóteses de Culmann-Meyer. Para além disso, ele defendeu e publicou que existia uma correspondência matemática perfeita entre a arquitectura trabecular e as trajectórias das tensões principais – *Trajectorial Theory*.

Roux (1881) adianta que a adaptação do osso a cargas mecânicas (alinhamento das

trabéculas com as trajectórias das tensões principais) é conseguida pelas células depositarem e absorverem osso de acordo com as variações de um estímulo mecânico.

Estas primeiras observações adiantavam a hipótese de adaptação mecânica do osso às solicitações de cargas exteriores aplicadas. Concretamente, o legado do século XIX nesta matéria está resumido nos seguintes pontos:

1. A estrutura do osso é regulada de tal modo que a massa é minimizada enquanto simultaneamente a rigidez é maximizada.
2. Existe uma correspondência matemática perfeita entre a orientação das trabéculas e as direcções das tensões principais (lei de Wolff – Wolff, 1986).
3. As células do osso alteram a arquitectura interna do osso como resposta a um estímulo mecânico.

Koch (1917) calculou as trajectórias de tensão num fémur humano considerando uma geometria de dimensões anatómicas e para forças aplicadas na cabeça razoavelmente precisas. Demonstrou que as orientações das trabéculas são similares às trajectórias de tensão obtidas por cálculo matemático para uma estrutura homogénea com geometria semelhante ao fémur.

A investigação científica relacionada com o tecido ósseo realizada durante a primeira metade do século XX residiu fundamentalmente no estudo do metabolismo (transferência e reserva de minerais) e histologia. Esta é a época classificada de biologia clássica do osso. A segunda metade do século XX é conhecida por biologia moderna do osso. O conceito do osso como órgão mecânico ganha tanta ou mais importância em relação ao conceito de reserva mineral. Assiste-se a um progresso no conhecimento sobre a dinâmica da remodelação óssea.

O termo de “biomecânica” é introduzido em 1970 e é definido como a ciência que estuda a estrutura e a função dos sistemas biológicos utilizando os métodos da mecânica. Em particular a “biomecânica do osso” surge como uma disciplina destinada à compreensão do funcionamento normal do tecido ósseo, previsão de alterações nesse tecido devido a alterações no funcionamento (remodelação óssea) e projecto de próteses ortopédicas.

Desde a segunda metade do século XX, o trabalho de investigação na biomecânica do osso tem conhecido um forte impulso na procura pela lei natural de remodelação óssea

(Pettermann *et al.*, 1997; Jacobs, 2000). O legado do século XIX, nomeadamente a lei de Wolff, tem servido como fonte de inspiração aos vários modelos de remodelação óssea que procuram explicar como o osso se adapta ao ambiente mecânico envolvente. No entanto, trabalhos recentes têm mostrado que algumas das hipóteses inicialmente adiantadas não se têm revelado inteiramente correctas.

Por exemplo, o estudo da remodelação óssea na zona proximal do fémur para diferentes casos de carga revela (Fernandes *et al.*, 1999b) que as trajectórias na orientação das trabéculas não se intersectam em ângulo recto em algumas zonas anatómicas conforme inicialmente apontado por Wolff. Adicionalmente, Sigmund (1999) concluiu que a arquitectura trabecular não deve ser simplesmente uma estrutura de rigidez optimizada para o carregamento aplicado, mas outros factores nomeadamente biológicos devem intervir. Portanto, quando se fala hoje de remodelação óssea a lei de Wolff assume um significado vago exprimindo apenas a ideia comumente aceite de que o osso adapta a sua arquitectura interna em função das solicitações mecânicas exteriores aplicadas (ver capítulo “The false premise in Wolff’s law” em Cowin, 2001).

5.2.2. Modelos de remodelação recentes

Esta secção tem por objectivo apresentar um estado da arte sobre os modelos de remodelação óssea propostos sobretudo a partir da década de 1960 (Frost, 1964; Pauwels, 1965). O modelo de Cowin (1976) – teoria da elasticidade adaptativa – talvez tivesse sido o primeiro modelo completo consistente sobre a adaptação do osso (ver também Cárter e Hayes 1976, 1977; Carter *et al.*, 1980). Vários modelos matemáticos e computacionais têm sido propostos para explicar a adaptação funcional do osso (vejam-se, e.g., Fyhrie e Carter, 1986; Huiskes *et al.*, 1987; Carter *et al.*, 1987, 1989; Weinans *et al.*, 1992; Mullender *et al.* 1994; Prendergast e Taylor, 1994; Martin, 1995; Jacobs *et al.*, 1997; Hart e Fritton, 1997; Fernandes *et al.*, 1999b; Doblaré e Garcia, 2002, 2001). O leitor interessado pode encontrar mais detalhes nas revisões de Hart (2001) ou Petermann *et al.* (1997).

Tipicamente, nestes modelos a modelação do osso é baseada na mecânica dos meios contínuos sólidos. No entanto, na realidade o osso é um meio descontínuo (poroso). A ideia da hipótese do contínuo aplicada ao osso é considerar as propriedades e o comportamento mecânico médio, equivalente ou aparente de um material caracterizado

por uma microestrutura complexa. Nestes modelos o osso é encarado do ponto de vista mecânico como um material singular, contínuo, com densidade variável. Modelos assim aplicados à escala do osso inteiro são designados de modelos de nível aparente, pelo que, é vulgar utilizarem-se as expressões de propriedades aparentes ou densidade aparente para contrastar com o que se passa ao nível do tecido ósseo. O material do tecido ósseo é considerado linear elástico e isotrópico (vejam-se, *e.g.*, Hart *et al.*, 1984; Huiskes *et al.*, 1987; Carter *et al.* 1987, 1989; Beaupré *et al.*, 1990; Weinans *et al.*, 1992, Kabel *et al.*, 1999). O módulo de elasticidade é função da densidade através de uma lei de potência quadrática ou cúbica. A taxa de variação da densidade depende da variação dos campos de deformação, tensão ou densidade de energia de deformação.

Os modelos dos trabalhos anteriores referidos são designados de natureza fenomenológica, calculando a variação da densidade aparente do osso (o resultado da actividade dos osteoblastos e osteoclastos) para cada ponto dependendo de um estímulo mecânico. Em geral, as principais conclusões destes trabalhos concordam no facto do ambiente mecânico local no osso desempenhar um papel importante no processo natural de adaptação óssea.

Conforme já referido, alguns dos modelos anteriores consideram o osso como um material estrutural isotrópico. Isto representa uma limitação na caracterização do osso trabecular pois desconsidera a importância da orientação no processo de remodelação óssea. Para ultrapassar esta limitação existem modelos que combinam a densidade aparente (relativa) do material e a orientação ou anisotropia (Jacobs *et al.*, 1997; Hart e Fritton, 1997; Fernandes *et al.*, 1999b; Rodrigues *et al.*, 1999b; Doblaré *et al.* 2002, 2001). Por exemplo, Fernandes *et al.* (1999b) modela o osso como um material celular de microestrutura ortotrópica e identifica a remodelação como um processo de optimização do material. Ainda outros modelos que levam em conta a anisotropia dispensam o cálculo da distribuição de densidade aparente pois baseiam-se em modelos de EF com *voxels/pixels* em larga escala (Jang e Kim, 2008; 2009; Tsubota *et al.*, 2009).

O modelo de remodelação óssea proposto nesta dissertação desenvolve a abordagem apresentada a duas dimensões por Rodrigues *et al.* (1999b, 2002), ver figura 5.11. Este é um modelo hierárquico macro-micro (global-local) onde um modelo global do osso inteiro fornece informação de deformação e densidade a um conjunto de modelos locais caracterizando a microestrutura trabecular em cada ponto do modelo global.

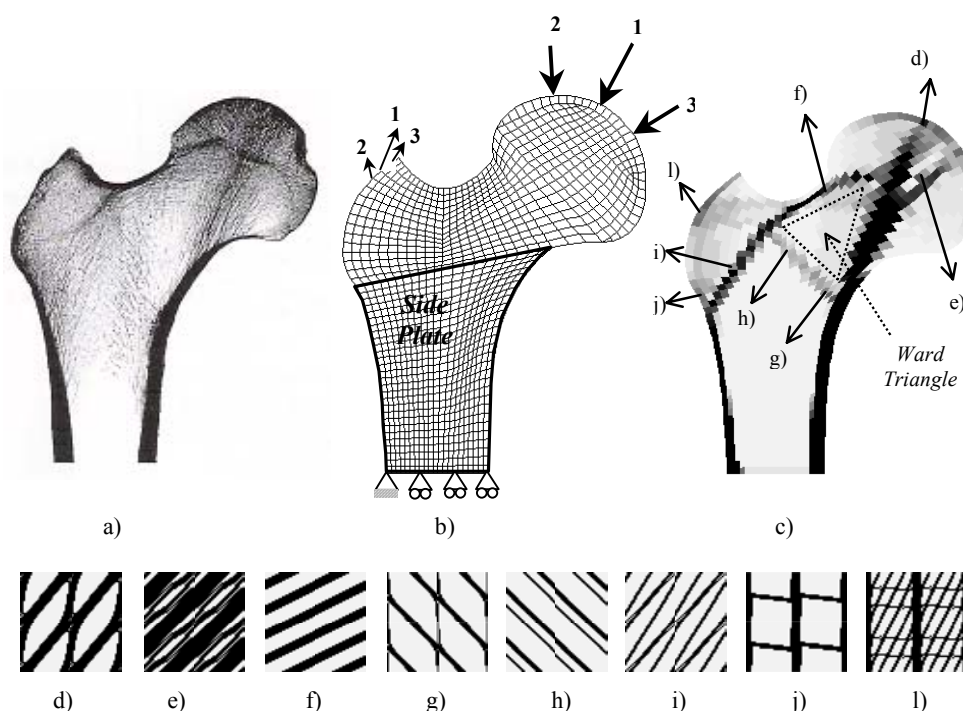


Figura 5.11. Resultados bidimensionais do modelo hierárquico. a) Secção coronal do fémur proximal; b) Modelo computacional; c) Distribuição de densidade aparente; d) – l) Microestruturas (extraído de Coelho *et al.*, 2005).

Efectivamente, o osso é um material hierárquico onde vários níveis de organização do material podem ser distinguidos desde a macro à nanoescala (secção 5.1.2). Os dois níveis de topo correspondendo ao osso inteiro e à estrutura trabecular, respectivamente, mostram uma distribuição adequada de propriedades físicas (densidade aparente e propriedades mecânicas) para satisfazer os requisitos funcionais do tecido ósseo. Introduzindo uma escala de projecto do material no modelo de remodelação óssea não só se evitam à priori restrições de simetria material como também se proporciona levar em conta outras características da arquitectura trabecular como, por exemplo, a permeabilidade e/ou a densidade de área de superfície óssea (um entre os vários índices morfométricos). Este passo adicional de integrar no modelo uma segunda escala de comprimento para modelar a microestrutura do osso possibilita modelar características biológicas e aproxima os modelos fenomenológicos dos modelos baseados na biologia (mecanobiológicos). Estes últimos procuram considerar ambos os factores, biológico e mecânico, baseados na actividade celular (vejam-se, *e.g.*, Huiskes *et al.*, 2000; Hazelwood *et al.*, 2001; Hernandez, 2001; Hernandez *et al.*, 2000; Taylor e Lee, 2003; Taylor *et al.*, 2004; García-Aznar *et al.*, 2005).

5.3. Modelo hierárquico de remodelação óssea

5.3.1. Modelo material

O modelo hierárquico de remodelação óssea assume o osso (figura 5.12a) como um material poroso do tipo celular com microestrutura periódica (figura 5.12b). O modelo material aqui apresentado é análogo ao descrito detalhadamente na secção 2.1 (comparem-se as figuras 2.1 e 5.12b).

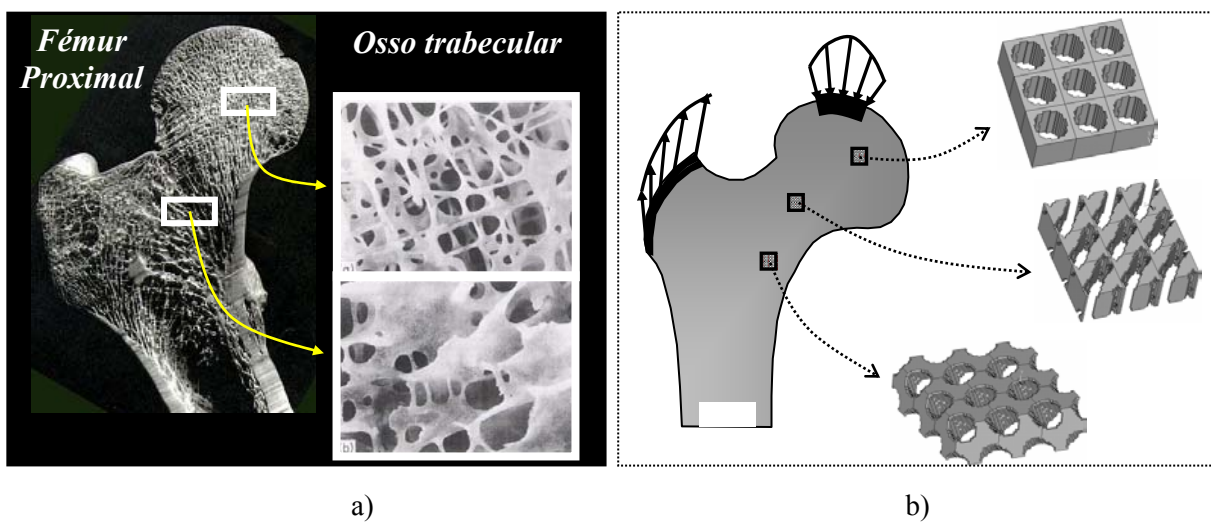


Figura 5.12. a) Osso real às escalas macro e microscópica; b) Modelo material a duas escalas.

O modelo material é constituído por duas escalas para caracterizar o tecido ósseo. À escala macroscópica considera-se o domínio Ω do osso inteiro sujeito a forças exteriores aplicadas que correspondem às solicitações mecânicas normais do dia a dia. À escala microscópica considera-se um domínio Y que tem correspondência com a escala do osso trabecular. O modelo calcula não só a densidade ρ aparente (relativa) em cada ponto \mathbf{x} do domínio Ω mas também a fracção volúmica μ em cada ponto \mathbf{y} de Y . A densidade ρ varia no intervalo $]0, \rho_{\text{máx}}]$ ($\rho_{\text{máx}} \leq 1$). Os extremos inferior e superior deste intervalo identificam a ausência de osso e osso compacto (com porosidade mínima de $1 - \rho_{\text{máx}}$), respectivamente. Um valor intermédio de ρ significa a existência de um material poroso (osso trabecular) que é caracterizado pela geometria de uma célula unitária que assume-se repetida de forma periódica no espaço definido por uma pequena vizinhança do ponto $\mathbf{x} \in \Omega$. Esta geometria é solução do problema local em Y onde $\mu \in]0,1]$. O material de base da célula unitária (tecido ósseo) é assumido linear e isotrópico (Kabel *et al.*, 1999). As

densidades ρ e μ estão relacionadas na equação (2.53).

5.3.2. Lei de remodelação óssea

Considerando o modelo material da secção anterior, a remodelação óssea pode ser descrita como um processo caracterizado por dois problemas de distribuição de material, um global (em Ω) e outro local (em Y para cada $\mathbf{x} \in \Omega$). A distribuição de densidade global ρ e densidade local μ é dada como solução do problema de optimização de topologia multiescala definido por (5.1) e (5.2). Em (5.1) assume-se que o osso se adapta para satisfazer um critério multi-objectivo, ou seja, rigidez estrutural (maximizada) e custo metabólico de formação de osso (minimizado). A equação (5.2) traduz a maximização da densidade de energia de deformação em cada ponto $\mathbf{x} \in \Omega$ e para um campo de deformação local fixo $e(\mathbf{u}^r)$ em que \mathbf{u}^r é solução do problema de equilíbrio global para o caso de carga r . Utiliza-se aqui uma formulação multicarga, ou seja, a densidade de energia de deformação em cada $\mathbf{x} \in \Omega$ é calculada como uma média ponderada pelo peso α atribuído a cada caso de carga r (no total P casos), $\sum_{r=1}^P \alpha^r = 1$. Neste critério de cargas múltiplas assume-se que um ciclo de aplicação das cargas tem um período muito menor do que o período de remodelação óssea de modo que as cargas aplicadas no modelo são consideradas estáticas e repetidas ao longo das iterações. Saliente-se que é apenas a iteração final (convergência do algoritmo) que configura uma situação passível de ser comparada com a realidade, ou seja, uma situação de estacionaridade do processo de remodelação óssea para um determinado carregamento exterior aplicado. Compare-se ainda a formulação (5.1) e (5.2) com (2.83) e (2.84) e vejam-se também os trabalhos de Rodrigues *et al.* (1999b, 2002) e Coelho *et al.* (2008a).

$$\min_{\rho(\mathbf{x})} F(\rho) \quad \text{with } F(\rho) = \int_{\Omega} \Phi(\rho, \mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^P) d\Omega + k \left(\int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}) d\Omega \right) \quad (5.1)$$

$\rho_{\min} \leq \rho(\mathbf{x}) \leq \rho_{\max}$

$$\Phi(\rho, \mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^P) = \max_{\mu(\mathbf{y})} f(\mu) \quad \text{where } f(\mu) = \sum_{r=1}^P \alpha^r \left[\frac{1}{2} E_{ijkl}^H(\mu) \varepsilon_{ij}(\mathbf{u}^r) \varepsilon_{kl}(\mathbf{u}^r) \right] \quad (5.2)$$

$\mu_{\min} \leq \mu(\mathbf{y}) \leq 1$

$\int_Y \mu(\mathbf{y}) dY = \rho(\mathbf{x})$

A função objectivo minimizada em (5.1) apresenta basicamente duas parcelas. A primeira representa a energia elástica total de deformação. A minimização desta energia corresponde à maximização da rigidez. A segunda controla o volume total de massa óssea em Ω .

Em seguida explica-se melhor o significado da segunda parcela do funcional em (5.1). O osso é um sistema aberto em termos de massa, isto é, a massa total não é conhecida à partida e depende do carregamento. Não faz sentido para o caso do osso impôr um constrangimento de volume do tipo $V \leq V^*$ como se faz tipicamente em problemas de optimização de topologia de estruturas (ver equação 2.83). Sendo assim, na função objectivo (5.1), o volume de osso é regulado pelo valor do parâmetro k (J/m^3). Este factor assume um significado biológico, ou seja, representa o “custo” metabólico na formação de osso dependente de factores tais como a idade, o sexo, a doença, a alimentação e distingue a resposta do osso em indivíduos diferentes quando sujeitos a situações de carga idênticas (Fernandes *et al.*, 1999b). O aumento do valor de k é interpretado biologicamente como um aumento do custo metabólico de formação de osso o que implica uma diminuição de massa óssea. Em sentido contrário, uma diminuição de k corresponde a um menor custo metabólico de formação de osso o que implica um aumento de massa óssea.

A teoria da homogeneização é utilizada para obter o tensor da elasticidade E^H_{ijkl} que engloba as propriedades elásticas homogeneizadas (equivalentes) do material poroso (osso trabecular) em cada ponto $\mathbf{x} \in \Omega$. Este tensor dado por (2.57) depende, por um lado, das propriedades elásticas da microestrutura E_{ijkl} que são função da densidade μ em Y através da lei polinomial (2.58) onde E^0_{ijkl} caracteriza o material base (tecido ósseo). Por outro lado, depende dos modos de deformação da célula χ^{kl} que são solução das equações de equilíbrio para o problema local ou na microestrutura (2.23).

A estacionaridade do problema de optimização multiescala (5.1) e (5.2) com $\rho_{\max} = 1$ conduz à seguinte equação de taxa de variação da densidade característica do processo de remodelação ao longo do tempo t :

$$\frac{d\mu}{dt} = \frac{\partial E^H_{ijkl}(\mu)}{\partial \mu(\mathbf{x}, \mathbf{y})} \sum_{r=1}^P [\alpha^r e_{ij}(\mathbf{u}^r) e_{kl}(\mathbf{u}^r)] - k \quad (5.3)$$

Em (5.3) e nas equações à frente o gradiente de \mathbf{E}^H relativamente à densidade microscópica é dado por (2.67).

Compare-se (5.3) com a condição de optimalidade (2.70). O factor custo metabólico k em (5.3) equivale em (2.70) ao multiplicador de Lagrange λ associado ao constrangimento de volume global.

A equação (5.3) expressa a variação da densidade microscópica μ com o tempo t (iterações do algoritmo de optimização) até ser alcançado o estado de equilíbrio no processo de remodelação, *i.e.*, até à seguinte condição ser satisfeita:

$$\frac{\partial E_{ijkl}^H(\mu)}{\partial \mu(\mathbf{x}, \mathbf{y})} \sum_{r=1}^P [\alpha^r e_{ij}(\mathbf{u}^r) e_{kl}(\mathbf{u}^r)] - k = 0 \Rightarrow \frac{d\mu}{dt} = 0 \quad (5.4)$$

Portanto, ao nível do material celular (microestrutura) e assumindo a formulação multicarga, a equação (5.4) caracterizando a evolução da densidade relativa do material com o tempo pode ser identificada como uma equação do tipo:

$$\frac{d\mu}{dt} = B(\mu) \sum_{r=1}^P [\alpha^r e_{ij}^r e_{kl}^r] + C(\mu) \quad (5.5)$$

Este tipo de lei de remodelação óssea pode ser entendida como a generalização de vários modelos de remodelação óssea que fazem uso da densidade de energia de deformação como estímulo mecânico (veja-se *e.g.* Mullender *et al.*, 1994), onde os coeficientes $B(\mu)$ e $C(\mu)$ são obtidos da solução óptima do problema (5.1) e (5.2):

$$B_{ijkl} = \frac{\partial E_{ijkl}^H(\mu)}{\partial \mu(\mathbf{x}, \mathbf{y})} \quad \text{e} \quad C = -k \quad (5.6)$$

A equação (5.4) pode ser resolvida numericamente através do seguinte esquema iterativo baseado num método de ponto fixo para obter a variação das densidades microscópicas (ver equações 3.2 e 3.3):

$$\mu_{e'}^{E'} \Big|_{t+1} = \begin{cases} \max[(1-\zeta)\mu_{e'}^{E'} \Big|_t, \mu_{min}] & \text{se } \gamma_{e'}^{E'} \mu_{e'}^{E'} \Big|_t \leq \max[(1-\zeta)\mu_{e'}^{E'} \Big|_t, \mu_{min}] \\ \gamma_{e'}^{E'} \mu_{e'}^{E'} \Big|_t & \text{se } \max[(1-\zeta)\mu_{e'}^{E'} \Big|_t, \mu_{min}] < \gamma_{e'}^{E'} \mu_{e'}^{E'} \Big|_t < \min[(1+\zeta)\mu_{e'}^{E'} \Big|_t, 1] \\ \min[(1+\zeta)\mu_{e'}^{E'} \Big|_t, 1] & \text{se } \gamma_{e'}^{E'} \mu_{e'}^{E'} \Big|_t \geq \min[(1+\zeta)\mu_{e'}^{E'} \Big|_t, 1] \end{cases} \quad (5.7)$$

$$\gamma_{e'}^{E'} = \frac{\sum_{r=1}^P \left[\alpha^r \frac{\partial E_{ijkl}^H(\mu)}{\partial \mu_{e'}^{E'}(y)} \langle e_{kl}(\mathbf{u}^r) \rangle_{E'} \langle e_{ij}(\mathbf{u}^r) \rangle_{E'} \right]}{k} \quad (5.8)$$

onde $t = 0, \dots, T$ é o contador de iterações e ζ é um limite móvel (para mais detalhes veja-se a descrição do método do critério de optimalidade apresentado na secção 3.2.1.1). A remodelação óssea atinge um estado de equilíbrio local quando $\gamma = 1$. Quando $\gamma > 1$ ocorre um aumento de fracção volúmica de osso (aposição) e quando $\gamma < 1$ ocorre uma diminuição (absorção).

A apresentação das equações (5.7) e (5.8) relaciona-se directamente com uma discretização pelo método dos elementos finitos. Este é o método numérico utilizado para obter uma solução aproximada das equações anteriores apresentadas na forma integral. Recorde-se que os índices e ($e = 1, \dots, m$) e E ($E = 1, \dots, M$) referem-se aos elementos finitos Y^e e \mathcal{Q}^E , *i.e.*, os elementos local e global, respectivamente, e $\langle \cdot \rangle_E$ é a média no elemento global E . Assume-se que ρ^E e μ_e^E são constantes dentro de cada \mathcal{Q}^E e Y^e . Resumindo, simulações de remodelação óssea podem ser realizadas através de (5.7) e (5.8) para calcular μ , enquanto ρ é obtido a partir de μ através de (2.53).

Alguns resultados preliminares a duas dimensões foram obtidos por Rodrigues *et al.* (1999b) utilizando o esquema iterativo descrito anteriormente. No entanto, neste método de solução existe a possibilidade de obter $\rho = 1$ em algumas regiões onde todos os μ 's atingem o limite superior de variação igual a 1. Estas soluções sólidas isotrópicas podem ser encaradas como uma primeira aproximação à modelação do osso compacto. Contudo, este tipo de osso nem é completamente denso nem é isotrópico mas, em vez disso, é um meio poroso com valores de porosidade entre 5%–10% e, em geral, é considerado com comportamento transversalmente isotrópico (Martin *et al.*, 1998).

Para obter uma melhor aproximação à microestrutura do osso compacto real (especialmente a modelação da porosidade vascular, veja-se secção 5.1.2), um nível mínimo de porosidade pode ser assegurado pelo modelo proposto através de uma diminuição do valor limite superior de variação da densidade aparente, ou seja, $\rho_{\max} < 1$. Esta restrição bem como a introdução de constrangimentos locais adicionais na solução das microestruturas tornam o método do critério de optimalidade dado por (5.7) e (5.8) difícil de utilizar (veja-se Bendsøe e Sigmund, 2003). Uma estratégia algorítmica mais eficiente para resolver (5.1) e (5.2) combina dois optimizadores, tomando cada um a respectiva variável de projecto baseada na densidade, ρ ou μ . A estratégia MMA/CONLIN descrita na secção 3.2.2.2 é utilizada nesta dissertação para obter a solução do problema de remodelação óssea formulado por (5.1) e (5.2). Esta

estratégia tira pleno partido da formulação hierárquica do problema tornando assim mais fácil a introdução de critérios locais biológicos influentes na solução da microestrutura conforme apresentados na secção seguinte.

5.3.3. Factores influentes na arquitectura interna do osso

A extensão do modelo hierárquico ao caso tridimensional no âmbito da presente dissertação permitirá uma melhor aproximação ao fémur real em vários sentidos: geometria anatómica, influência dos estados de deformação/tensão devido a torção e flexão para fora do plano coronal, a caracterização do comportamento mecânico da arquitectura trabecular através da análise de microestruturas tridimensionais e a introdução de factores biológicos como constrangimentos nas soluções de topologia da microestrutura do material.

Sobre este último aspecto, Sigmund (1999) analisa apenas o problema local de microestruturas tridimensionais optimizadas para a rigidez considerando estados de tensão triaxiais e densidade local fixos. Os resultados obtidos mostram que a topologia de célula que maximiza a rigidez apresenta paredes fechadas, o que não é biologicamente admissível, pois o osso trabecular apresenta uma rede de poros interligados preenchidos com a árvore vascular e medula.

Conclui-se então que o osso trabecular não é simplesmente o óptimo da rigidez, mas que outros factores devem influenciar a sua arquitectura. Daqui resulta a necessidade de introduzir numa versão tridimensional do modelo hierárquico constrangimentos relacionados com factores biológicos, tais como: anisotropia, porosidade, conectividade, permeabilidade, densidade de superfície, interacção fluido/sólido, vascularidade, etc. A maior parte destes factores só tem mesmo verdadeiro significado e influência num modelo a três dimensões do osso.

Os estudos do fluxo do sangue no osso surgiram primariamente pela necessidade de saber quais os vasos sanguíneos que podiam ser sacrificados durante uma cirurgia¹. A passagem dos vasos sanguíneos pelo osso faz-se basicamente de duas formas. Uma das formas é a vascularidade feita pelo interior (matriz) do osso e que é típica no caso do tecido cortical através dos canais Haversianos e de Volkmann. A outra forma é feita pelo exterior do osso, típica no caso do osso trabecular através do espaço intertrabecular.

¹ Mapa de circulação sanguínea no osso por Langer em 1875.

Qualquer uma das formas pode ser reconhecida na figura 5.2 ou 5.13, nesta última apresenta-se a vascularidade numa tíbia.

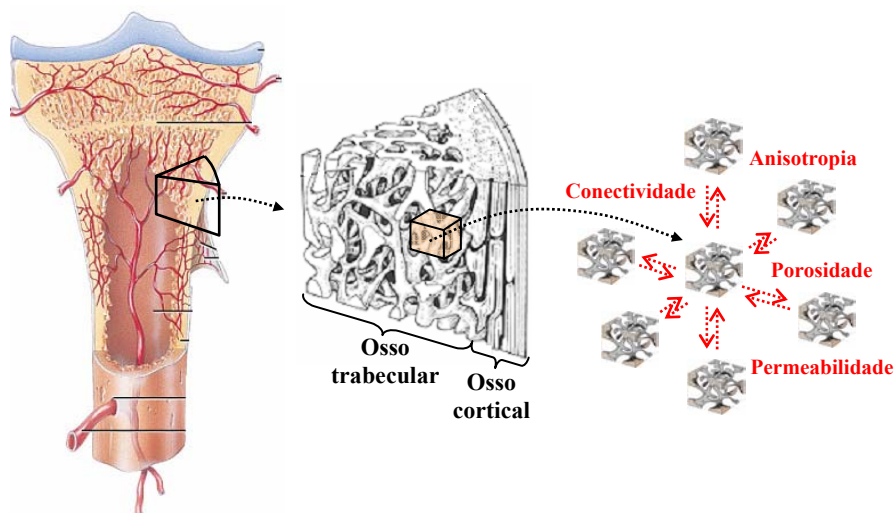


Figura 5.13. Secção coronal proximal da tíbia ilustrando a influência de alguns factores na arquitectura trabecular².

A escala microscópica considerada no modelo hierárquico corresponde à escala do osso trabecular. A este nível é a circulação sanguínea no espaço intertrabecular que interessa considerar. A pressão sanguínea no osso é da ordem de 40 a 60 mm de mercúrio (Hg). O efeito desta pressão sobre as superfícies das trabéculas e o impacto no processo de remodelação óssea pode ser um factor a considerar no modelo. No entanto, a modelação computacional de uma árvore vascular e integração com um modelo de remodelação óssea é demasiado complexa. Acrescente-se ainda que, como ponto de partida, não existem resultados de investigação publicados na literatura relevantes sobre a interacção entre os vasos sanguíneos e o osso trabecular. A falta de conhecimento nesta área combinada com a falta de modelos convenientes para experimentação tem levado a comunidade científica a concentrar-se mais no estudo da influência do fluxo sanguíneo no osso cortical (Dillaman *et al.*, 1991; Cowin, 1999; Wang *et al.*, 2003a; Barou *et al.*, 2002; Hillsley e Frangos, 1994).

Para além da interacção entre os vasos sanguíneos e o osso considere-se também a interacção entre os fluidos do osso e a sua parte sólida (Cowin, 1999). Relevante para o modelo tridimensional pretendido pode ser o estudo da interacção da medula com as trabéculas do osso e os seus efeitos mecânicos (Currey, 2002). A medula à temperatura do corpo humano é um fluido viscoso tornando-se no factor responsável pelo comportamento

² Montagem de figuras retiradas da Internet.

viscoelástico do osso. No entanto, este tipo de comportamento mecânico é fundamentalmente exibido para valores de extensão no osso em carga superiores a 3000μ . Na realidade, estes são valores de extensão elevados só atingidos em ocasiões muito excepcionais. Para as solicitações normais do dia a dia as extensões são inferiores (normalmente entre 200μ a 1500μ) e como tal pode ser assumido que o osso tem um comportamento mecânico linear elástico. Pode-se reconhecer ainda também o efeito benéfico da pressão hidrostática da medula sobre as paredes do osso prevenindo a fractura e a distorção. No entanto, *in vivo* o valor desta pressão em condições normais também é baixo tendo uma influência mínima. Portanto, a medula contribui para a massa mas pouco contribui para a resistência e rigidez do osso a cargas estáticas, dinâmicas e de impacto consideradas normais (Bryant 1983,1988,1995; Soboková *et al.* 1988; Currey 2002; Linde 1994). O tecido ósseo apresenta porosidade interna e externa. No interior do tecido ósseo são reconhecidos três tipos de porosidade: vascular, lacunar-canicular e colagénio-mineral. No exterior do tecido ósseo a porosidade é intertrabecular. É este tipo de porosidade que se torna relevante considerar no modelo hierárquico. Os poros no espaço intertrabecular têm uma dimensão bastante variável fortemente dependente da zona anatómica. As zonas menos solicitadas mecânicamente são menos densas enquanto as zonas mais solicitadas são mais densas. As dimensões dos poros podem variar entre 0.1 mm e 1 mm. A porosidade trabecular não serve apenas um propósito de eficiência estrutural como se o osso fosse apenas o resultado de uma relação optimizada entre massa e rigidez. Esta porosidade serve também o requisito biológico de vascularização, *i.e.* fornecer oxigénio e nutrientes às células e remover os produtos metabólicos e de alojamento de medula.

Um factor relacionado com a porosidade é a conectividade. Para além de existirem poros é necessário que estes estejam ligados entre si de modo a garantir uma continuidade do escoamento de fluido e matéria orgânica. O mesmo conceito de conectividade coloca-se também ao nível das trabéculas. As ligações das trabéculas entre si formam uma rede semelhante a uma estrutura reticulada de engenharia para suportar cargas aplicadas.

Pelo exposto, numa primeira aproximação do modelo hierárquico às características do osso envolvendo constrangimentos biológicos são desprezados os efeitos mecânicos da interacção viscosa da medula com o osso e da pressão vascular. O modelo hierárquico de remodelação óssea desta dissertação concentra-se fundamentalmente nos efeitos da anisotropia, porosidade,

densidade de superfície e permeabilidade. Em seguida, cada um destes factores é desenvolvido com maior detalhe.

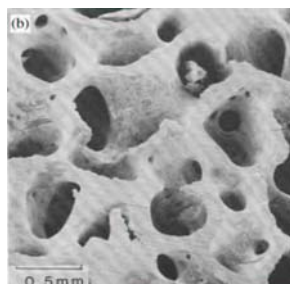
5.3.3.1. Anisotropia do osso trabecular

O modelo hierárquico de remodelação óssea permite obter microestruturas representativas de cada zona anatómica do osso através da solução de vários problemas locais de distribuição de material com variáveis de densidade microscópicas. Estes problemas são designados de problemas locais anisotrópicos pois nenhuma simetria material é imposta à priori. Este tipo de aproximação ao osso trabecular permite considerar a influência da anisotropia no modelo de remodelação óssea.

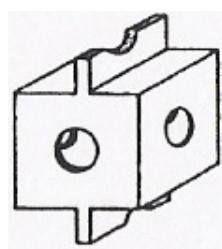
A anisotropia está associada à distribuição eficiente do material para melhorar a relação rigidez estrutural/massa. A importância deste factor é evidente na arquitectura trabecular quando se observa o alinhamento das trabéculas em direcções preferenciais bem definidas do espaço (teoricamente segundo as trajectórias das direcções principais das tensões mecânicas de acordo com a lei de Wolff).

Em regiões onde domina um estado de tensão triaxial mais ou menos elevado (sobretudo nas zonas sujeitas ao efeito multicarga) surgem microestruturas tendencialmente equiaxiais mais ou menos densas (ver figura 5.14 – topo). Onde a densidade é maior a microestrutura tem analogia com as placas ou paredes perfuradas de uma caixa, onde é menor tem analogia com uma estrutura do tipo reticulada, i.e., de barras ligadas entre si. O comportamento mecânico nestas regiões do osso é mais próximo do isotrópico. Em contraste, existem regiões onde a microestrutura é fortemente orientada segundo uma direcção do espaço – microestrutura anisotrópica. As microestruturas nestes casos têm semelhança com células prismáticas em favo de abelha (ver figura 5.14 – centro) ou placas dispostas paralelamente e ligadas por barras na direcção normal (ver figura 5.14 – em baixo).

Estrutura equiaxial de alta densidade

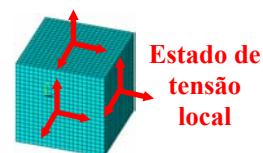


Idealizações de microestrutura (célula base)



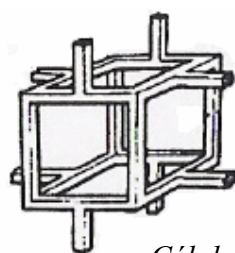
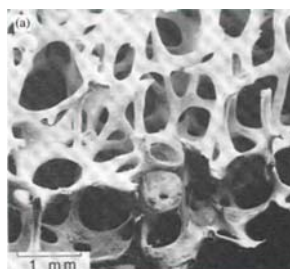
Placa perfurada

Célula quase "fechada"



Carga triaxial (elevada)

Estrutura equiaxial de baixa densidade

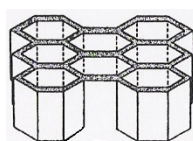
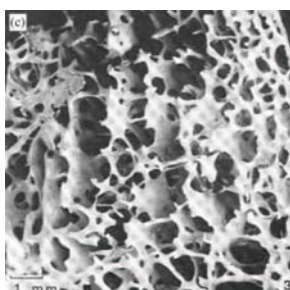


Estrutura de barras

Célula aberta

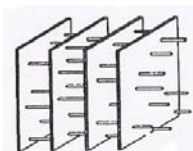
Carga triaxial (baixa)

Estrutura orientada



Estrutura em favo de abelha

Carga uniaxial



Placas paralelas

Carga biaxial

Figura 5.14. Imagens de osso trabecular obtidas através de Microscopia Electrónica de Varrimento para diferentes zonas anatómicas do fémur proximal. Idealizações de microestrutura do osso dependendo do estado de tensão local e diferentes graus de anisotropia consequentes (Imagens de microscopia e de idealização de célula retiradas de Gibson, 1985).

5.3.3.2. Anisotropia e porosidade do osso cortical

O osso cortical que constitui a diáfise dos ossos longos e a parede exterior da zona da metáfise é geralmente considerado transversalmente isotrópico. De acordo com análise experimental, a rigidez ou resistência do osso medida na direcção longitudinal pode ser cerca de uma vez e meia superior ao valor medido na direcção transversal. Esta dependência direccionada das propriedades mecânicas do osso pode ser facilmente compreendida levando em consideração a organização da microestrutura do osso cortical. Os osteões (sistema Haversiano) estão alinhados na direcção longitudinal (ver figura 5.2) e assim rigidificam o

osso na direcção do comprimento. Pelo contrário, no plano transversal, a matriz óssea (lamelas intersticiais) exibindo uma estrutura menos organizada confere ao osso um comportamento mais próximo do isotrópico. No que diz respeito à morfologia da microestrutura das trabéculas, tal é desprovida de uma estrutura osteonal com canais de Havers visto que as dimensões características da secção de uma trabécula são demasiado pequenas e por isso incompatíveis com a formação dos osteões de dimensões características mais elevadas. Assim, o tecido ósseo constituinte de uma trabécula é uma estrutura lamelar menos orientada (mais isotrópica) do que a estrutura osteonal do osso compacto, veja-se Lucas *et al.* (1999).

De acordo com as considerações anteriores ao nível da microestrutura do osso, a hipótese de isotropia do material de base assumida no modelo hierárquico é intencionada de modo a aplicar-se à modelação do tecido ósseo trabecular e estrutura lamelar da matriz óssea do osso cortical (descontando os canais de Havers). Visto que a anisotropia do osso cortical provém basicamente da estrutura osteonal (sistema Haversiano), o modelo hierárquico proposto leva este aspecto em consideração através de um constrangimento de porosidade. Sendo assim, o osso cortical não é modelado como uma solução local de material sólido isotrópico mas, em vez disso, como um meio poroso de porosidade comparável à do osso real (5-10%), veja-se Martin *et al.* (1998). Um valor de 7.5%, ou seja, $\rho_{\text{máx}} = 0.925$, é usado nos resultados apresentados à frente nesta dissertação.

5.3.3.3. Densidade da área de superfície de osso trabecular

Toda a actividade das células ósseas ocorre ao nível das superfícies do osso. Ambas as superfícies do osso, interior (interfaces medula/trabécula no osso trabecular e paredes dos canais de Havers no osso cortical) e exterior (endeósteo e periósteo), são lugares possíveis de ocorrer remodelação óssea. Assumindo taxas normais de renovação óssea (substituição periódica de osso) num adulto, o osso cortical tem uma média de 20 anos e o osso trabecular 1 a 4 anos. Estes valores são consistentes com o facto da superfície de osso trabecular contribuir com mais do que 60% da superfície total de osso no corpo humano.

A adaptação da microestrutura do osso a variações do ambiente mecânico envolvente implica a orientação dos elementos estruturais do osso (trabéculas) de modo a aumentar a resistência mecânica nas direcções de maior solicitação. Visto que todas as actividades das

células do osso ocorrem nas superfícies, a adaptação óssea pode ser encarada como um processo de superfície onde a quantidade de área de superfície disponível é determinante.

Um parâmetro morfométrico caracterizando a arquitectura trabecular é o quociente superfície/volume, S_v , conhecido também por “densidade de área de superfície de osso” ou apenas “densidade de superfície”. Este parâmetro é definido como a quantidade de área de superfície de osso numa dada amostra de osso trabecular dividida pelo volume total (o espaço da matriz óssea mais o espaço preenchido com medula) (Beaupré *et al.*, 1990). Vários investigadores têm estudado este quociente superfície/volume para amostras reais de osso trabecular e modelos de microestrutura de osso idealizados. Um resultado unânime destes trabalhos de investigação é que existe uma forte relação entre a densidade de superfície S_v e a densidade aparente ρ do osso (vejam-se e.g. Parfitt *et al.*, 1983; Martin, 1984; Fazzalari *et al.*, 1989; Fyhrie *et al.*, 1993; Fyhrie *et al.*, 1995). Algumas relações não lineares encontradas nestes últimos trabalhos referenciados estão resumidas no gráfico da figura 5.15. Por exemplo, de acordo com Martin (1984) a relação entre S_v e a porosidade p ($p = 1 - \rho$) é dada pelo polinómio do quinto grau (5.9).

$$S_v = 32.3p - 93.9p^2 + 134p^3 - 101p^4 + 28.8p^5 \quad (5.9)$$

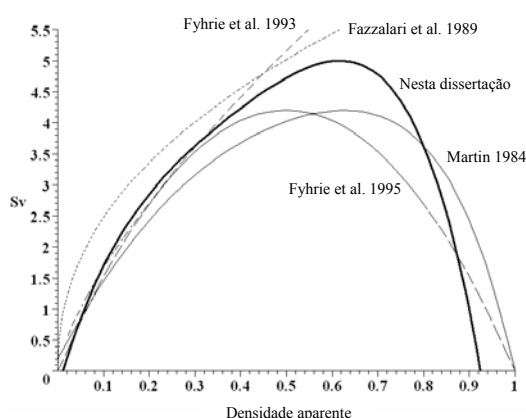


Figura 5.15. Curvas da densidade de área de superfície de osso S_v [mm^2/mm^3] a variar em função da densidade aparente de acordo com os trabalhos dos vários autores referenciados.

A curva resultante de (5.9) apresentada na figura 5.15 ilustra que a área de superfície de osso disponível para remodelação não é uma função uniforme da densidade mas, em vez disso, apresenta um máximo para valores intermédios da densidade aparente. Portanto, regiões com diferentes valores de fracção volúmica podem apresentar um potencial

substancialmente diferente em termos de remodelação óssea pois variações de ganho ou perda de osso dependem da quantidade de superfície disponível para a actividade celular. Além disso, observe-se na figura 5.15 que as curvas de Martin (1984) e Fyhrie *et al.* (1995) satisfazem o constrangimento físico de que o osso sem volume ($\rho = 0$) e o osso sem poros ($\rho = 1$) apresenta superfície aproximadamente nula.

Vários modelos de remodelação óssea associam a densidade com a orientação do material (anisotropia) mas desconsideram a importância biológica da superfície do osso. O modelo hierárquico apresentado nesta dissertação faz uso da aplicação de uma medida de superfície das microestruturas (ver secção 2.5.3.1) e introduz a densidade de superfície como uma condição biológica orientadora no processo de simulação da adaptação óssea ao ambiente mecânico exterior aplicado.

A lei de remodelação óssea considerada aqui assume ainda a maximização da rigidez estrutural do osso, (5.1) e (5.2), mas agora a variação da densidade microscópica μ (o resultado da actividade coordenada e simultânea dos osteoblastos e osteoclastos) é orientada pela necessidade biológica imposta de uma certa quantidade de área de superfície de osso para efectuar a adaptação estrutural apropriada. Em termos de formulação matemática, o problema local (5.2) leva em conta agora um constrangimento local adicional que garante uma densidade de área de superfície mínima, S_v^* :

$$\left(\frac{\beta}{|Y|} \right) g(\mu) \geq S_v^* \quad \text{where, } S_v^* = -0.2412 + 24.8\rho - 64.7\rho^2 + 103.7\rho^3 - 67.5\rho^4 \quad (5.10)$$

Em (5.10), $|Y|$ é o volume da célula de base igual a $1.5 \times 1.5 \times 1.5 \text{ mm}^3$. Neste caso, não é considerada uma célula de base unitária pois a microestrutura do osso é agora modelada levando em conta que deverá acomodar uma dimensão média de poros entre 300 e 1500 μm (Keaveny *et al.*, 2001). O parâmetro β é seleccionado para corrigir a sobreavaliação da superfície devido à presença de valores intermédios da densidade na definição da microestrutura (β é fixo em $2/3$), ver secção 2.5.3.1. A função de densidade de área de superfície S_v^* usada em (5.10), veja-se a curva representada a negrito na figura 5.15, é escolhida como um compromisso entre as diferentes curvas apresentadas na literatura por vários autores. Além disso, S_v^* é zero nos extremos de variação $\rho_{\min} = 0.01$ (ausência de osso) e $\rho_{\max} = 0.925$ (assume-se que a solução de osso compacto não é afectada pelo controlo da superfície).

5.3.3.4. Permeabilidade intertrabecular

O estudo da permeabilidade do osso trabecular tem sido realizado de forma experimental (*in vitro*) recorrendo à Lei de Darcy que descreve o escoamento de um fluido através de um meio poroso. A permeabilidade medida em amostras de osso trabecular correspondentes a diferentes zonas anatómicas, está associada ao espaço vazio caracterizado por uma rede de poros interconectados que *in vivo* se encontra ocupado por fluido viscoso e tecido vascular. As propriedades mecânicas e de transporte do osso têm sido descritas como fortemente dependentes da orientação e localização anatómica (Kohles e Roberts, 2002; Nauman *et al.*, 1999, Kohles *et al.*, 2001). A interconectividade da rede tridimensional de trabéculas (barras/placas ligadas entre si no espaço) define essa dependência espacial e direccional que influencia tanto a elasticidade estrutural como a permeabilidade do meio poroso. Tipicamente os resultados experimentais de permeabilidade κ_i baseiam-se nas medições efectuadas em cada uma de três direcções espaciais ortogonais entre si (eixos anatómicos ortogonais), ou seja, i = Medial-Lateral (ML), Anterior-Posterior (AP) e Superior-Inferior (SI):

$$\kappa_i = \frac{\dot{m}_i L_i \mu}{\rho A \Delta p} \quad (5.11)$$

Nesta equação, κ_i é a permeabilidade medida na direcção i , \dot{m}_i é a taxa de variação do fluxo de massa, L_i é o comprimento da amostra, μ é a viscosidade do fluido, ρ é a densidade do fluido, A é a área da secção transversal da parte porosa e Δp é o gradiente de pressão hidráulica através da amostra. Acrescente-se que também é usual considerar uma permeabilidade resultante $|\kappa|$ definida a partir dos três resultados direccionais κ_i :

$$|\kappa| = \sqrt{\kappa_{ML}^2 + \kappa_{AP}^2 + \kappa_{SI}^2} \quad (5.12)$$

Para além das medições directas da permeabilidade via experimental, também têm sido procuradas relações empíricas entre permeabilidade e porosidade como, por exemplo, a equação de Kozeny (Arramon e Cowin, 1997; Scheidegger, 1974; Kessler *et al.*, 1999):

$$\kappa(p) = \frac{C \times p^3}{[S_v(p)]^2} \quad (5.13)$$

Nesta equação considera-se que a densidade de área de superfície de osso trabecular (S_v) é calculada assumindo que o volume de poro medido para cada amostra (cubo) de osso trabecular é composto por espaços vazios intertrabeculares de forma esférica com uma

dimensão característica até 1 mm. A constante de Kozeny, C , é um parâmetro de forma do poro e é numericamente ajustada para encontrar a relação entre os valores medidos experimentalmente de permeabilidade e porosidade. A figura 5.16 representa graficamente a expressão (5.13) conforme pode ser vista também em Herrera *et al.* (2008).

A medição da permeabilidade do osso trabecular tem sido reconhecida como um contributo importante para o desenvolvimento de índices de anisotropia (Kohles, 2000) e modelos poroelásticos (Cowin, 1999), e para prover critérios de projecto na concepção de *scaffolds* em engenharia de tecidos (Vacanti e Bonassar, 1999; Herrera *et al.*, 2008; Hollister e Lin, 2007; Kang e Hollister, 2007).

No modelo de remodelação óssea proposto nesta dissertação a permeabilidade é introduzida como um constrangimento local na lei de remodelação (5.1) e (5.2), de forma análoga ao que foi feito para o caso das estruturas mecânicas. No entanto, a permeabilidade mínima introduzida no modelo não segue propriamente a curva empírica dada pela equação de Kozeny. De acordo com o exposto na secção 2.5.3.2 a permeabilidade é imposta não em termos de valores absolutos, mas em termos relativos (entre 0 e 1) ou percentuais (0% a 100%). Na secção seguinte de resultados é analisado o efeito de se considerarem diferentes curvas de variação da permeabilidade relativa com a densidade aparente.

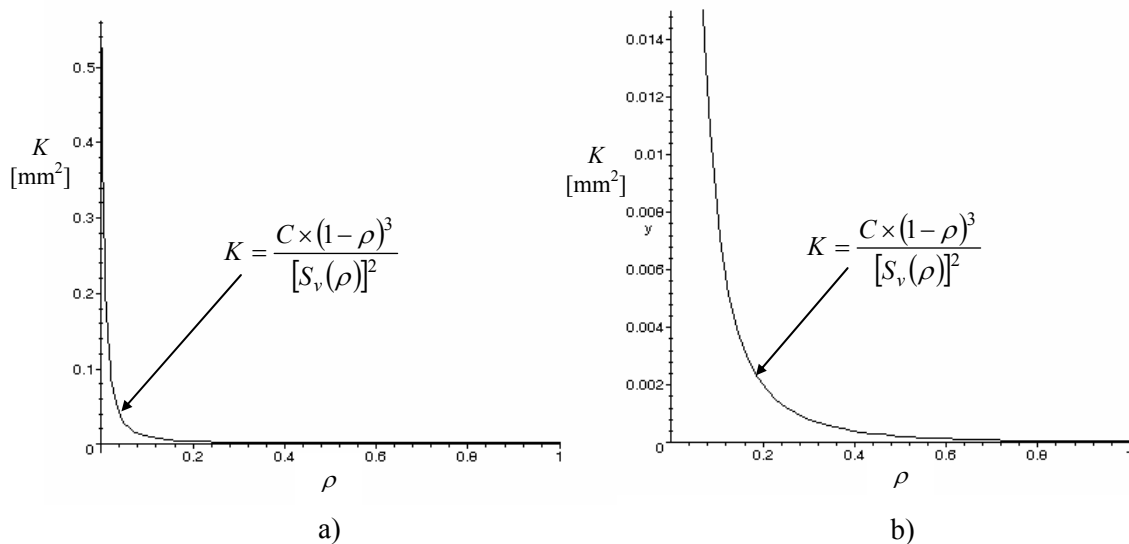


Figura 5.16. Permeabilidade como função da densidade assumindo $C = 0.022$ (Kohles e Roberts, 2002) e S_v é dada em Martin (1984): a) Representação de toda a função; b) Representação dos valores das ordenadas até 0.015 conforme visto em Herrera *et al.* (2008).

Capítulo 6

Aplicações à Remodelação Óssea

Este segundo capítulo de resultados mostra as aplicações do modelo hierárquico à simulação da remodelação óssea. A aplicação apresentada consiste num osso fémur proximal (secção 6.1) sujeito a dois modelos de carregamento (secção 6.2). Os resultados de distribuição da densidade aparente e microestruturas são apresentados de modo a evidenciar as diferenças que resultam de se utilizarem vários critérios no modelo de remodelação, nomeadamente: porosidade, densidade de superfície e permeabilidade (secção 6.3). A influência do factor custo metabólico permite simular diferentes níveis de massa óssea retratando tanto uma situação normal de saúde bem como de doença, por exemplo, osteoporose. Finalmente o modelo hierárquico de remodelação óssea proposto nesta dissertação é validado mediante resultados obtidos de exames DXA (secção 6.4).

6.1. Modelo numérico do osso fémur

O osso fémur constitui o estudo de caso nesta dissertação em termos da simulação computacional da remodelação óssea interna. É utilizada uma aproximação por EF do osso fémur humano esquerdo. O modelo tridimensional apresentado corresponde à parte proximal desse osso onde se podem claramente distinguir os tecidos ósseos cortical e esponjoso (ver secção 5.1.3). A geometria do osso foi obtida do trabalho de Viceconti *et al.* (1996) – fémur normalizado. Basicamente, o desenvolvimento do modelo de EF apresentado nesta secção

aproveitou daquela geometria inicial o modelo de NURBS¹ caracterizando a superfície exterior do osso. Em seguida, evoluiu-se para um modelo de curvas de nível a partir da intersecção das áreas da geometria inicial com vários planos, resultando assim várias fatias (ver figura 6.1a). Cada superfície delimitada pela respectiva curva de nível foi por sua vez dividida em quatro partes de modo que o espaço ocupado pela geometria do osso entre cada duas fatias é caracterizado por quatro gomos. Para cada gomo é gerado um volume a partir das áreas delimitadoras (ver figura 6.1b).

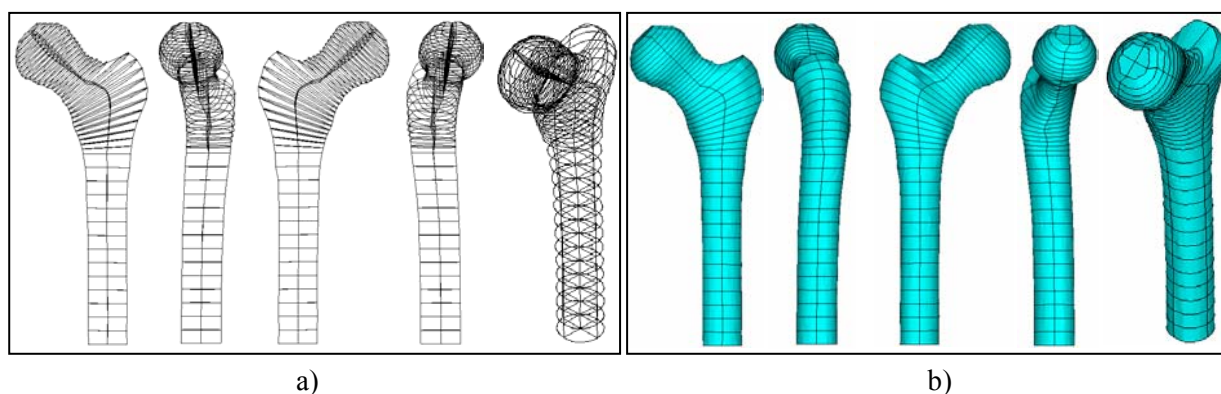


Figure 6.1. Modelo do osso fêmur: a) Curvas de nível e superfícies; b) Volumes.

Estando concluído o modelo de volumes, segue-se o processo de malhagem por EF que parte de uma discretização por EF da área de base (identificada com a fatia transversal mais distal). Através do comando do ANSYS, VSWEEP, é possível gerar elementos tridimensionais a partir de bidimensionais, ou seja, por arrastamento através de um volume dos EF gerados para uma superfície adjacente a esse volume. Repetindo sucessivamente esta operação é gerada a malha de EF apresentada na figura 6.2.

O modelo de EF da figura 6.2 é constituído por 2112 elementos hexaedros isoparamétricos de 8 nós cada (elemento do ANSYS designado de *SOLID64: 3-D Anisotropic Structural Solid*). A figura 6.3 apresenta um gráfico da distribuição de volumes dos elementos da malha do osso fêmur utilizada. Este gráfico ajuda a ter uma ideia da regularidade ou irregularidade da malha em termos das dimensões dos elementos finitos. Na geração desta malha pretendeu-se evitar uma grande disparidade de dimensões entre os vários elementos finitos. Conforme se observa, os primeiros 700 elementos da malha modelam a metáfise e apresentam tipicamente volumes da mesma ordem de grandeza, 50 a 200 mm³. A maior dispersão ao nível das dimensões dos elementos da malha ocorre para a zona do Trocânter (elementos 700 a 1500).

¹ Non Uniform Rational Basis Spline

A cabeça é a região onde os elementos apresentam menores dimensões (elementos 1500 a 2112). Quanto a detalhes adicionais do modelo numérico (incluindo a microestrutura) aplicam-se as considerações do capítulo 3.

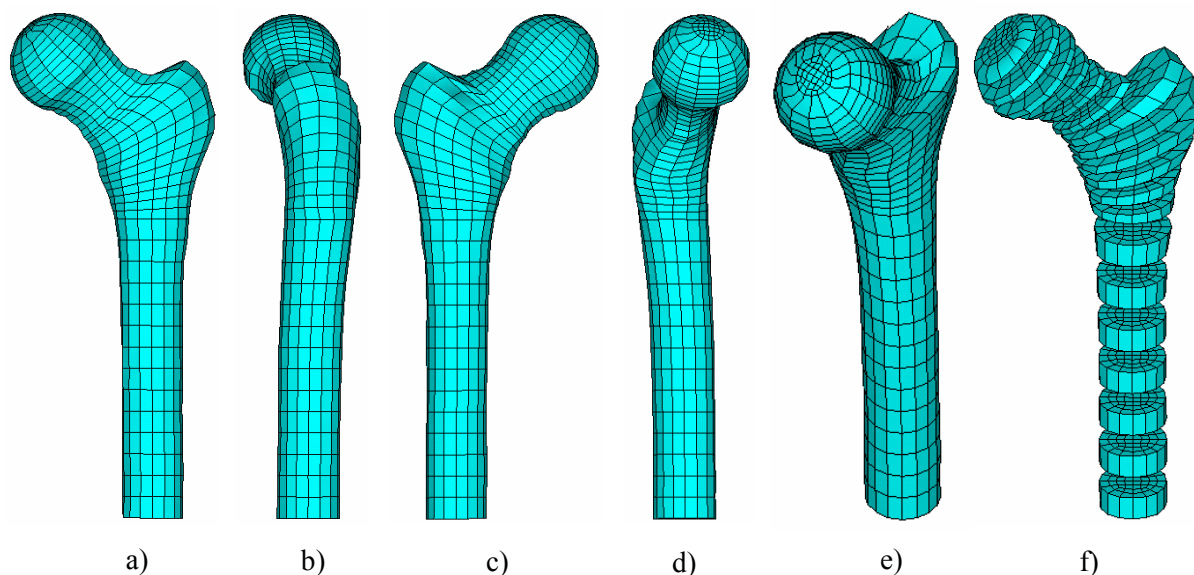


Figure 6.2. Modelo de elementos finitos do osso fêmur (esquerdo) com diferentes vistas representadas: a) Anterior; b) Lateral; c) Posterior; d) Medial; e) Isométrica; f) Anterior-posterior combinada com superior-inferior e cortes em fatias para visualização do interior.

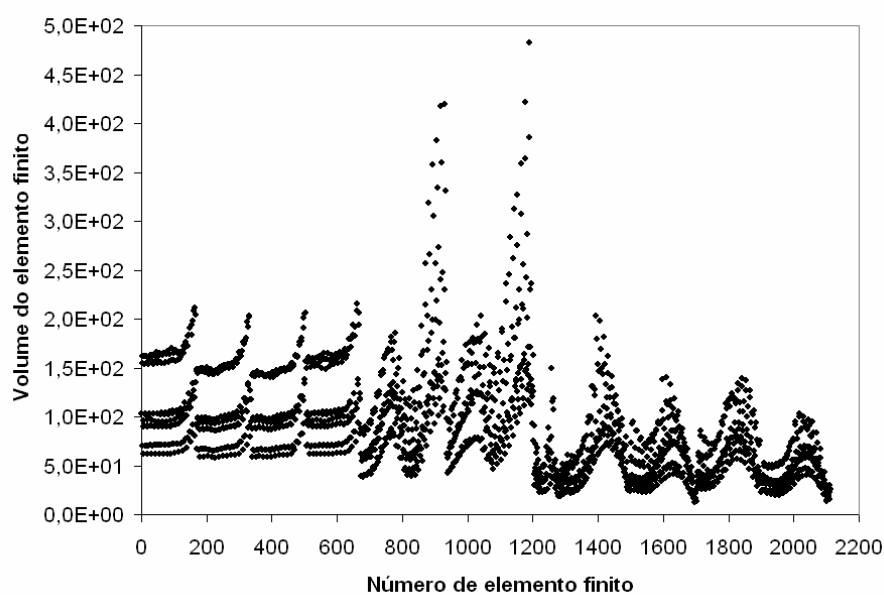


Figura 6.3. Volume [mm^3] dos elementos finitos da malha do modelo do osso fêmur.

6.2. Cargas exteriores aplicadas

Na investigação da remodelação óssea, condições fisiológicas de cargas exteriores aplicadas ao osso são fundamentais para obter resultados consistentes com a realidade visto que a estrutura interna do osso revela claramente uma adaptação ao ambiente mecânico envolvente. Tendo em mente este aspecto, apresentam-se nesta dissertação basicamente dois modelos de cargas múltiplas aplicadas no fémur. O primeiro, secção 6.2.1, é muitas vezes utilizado na literatura embora seja muito simplificado em termos da diversidade das forças aplicadas e do modo como estas são aplicadas (cargas pontuais). O segundo, secção 6.2.2, é um modelo de carregamento desenvolvido no âmbito desta dissertação com o objectivo de tornar o ambiente mecânico mais realista. Ambos os modelos de carregamento levam em conta o trabalho experimental de medição de forças em laboratório com pessoas usando próteses femorais instrumentadas.

6.2.1. Modelo de carregamento tipo I

O primeiro modelo de cargas aplicadas é constituído por três casos de carga ($P = 3$) que, em conjunto, representam uma média das actividades diárias de um indivíduo. Este modelo é apresentado em Kuiper (1993). As intensidades e direcções das forças são baseadas nas medições de Bergmann *et al.* (1990) e Kotzar *et al.* (1991). Os dois primeiros casos de carga representam as forças máximas (picos de força) na junta articular que se desenvolvem durante a fase de apoio da marcha humana normal (Bergmann *et al.*, 1990 e Kotzar *et al.*, 1991) e o terceiro caso de carga representa a máxima carga na junta articular durante a actividade de subir escadas (Kotzar *et al.*, 1991). O primeiro caso de carga apresenta o valor máximo de carga na junta articular (2460N), enquanto o terceiro caso de carga apresenta a maior componente das forças para fora do plano frontal (perpendicular a este plano), ver tabela 6.1.

A tabela 6.1 também apresenta para cada caso de carga a direcção e intensidade das forças aplicadas pelos três principais músculos da parte mais proximal do fémur que são os músculos glúteos (músculos abdutores): músculo pequeno glúteo, músculo médio glúteo e músculo grande glúteo (ver figura 5.5). Os valores destas forças musculares são extraídos dos trabalhos de Crowninshield e Brand (1981) e Dostal e Andrews (1981). Considera-se que todos os casos de carga têm igual importância, ou seja, tem-se o peso $\alpha_i = 1/3$ com $i = 1, \dots, 3$. A figura 6.4

apresenta a aplicação pontual (num nó) das forças da tabela 6.1 no modelo numérico de elementos finitos do osso fêmur proximal (referencial indicado na figura 6.4a). Os pontos de aplicação estão aproximadamente contidos no plano médio frontal ou coronal.

Tabela 6.1. Modelo de carregamento I. Resultante das forças aplicadas e respectivas componentes para a junta articular e músculos.

Actividade	Caso de carga	Forças na junta articular [N]				Forças dos músculos [N]			
		F_x	F_y	F_z	$ \mathbf{F} $	F_x	F_y	F_z	$ \mathbf{F} $
Andar normal	1	-973	-2248	-224	2460	772	1271	850	1713
	2	-681	-1693	136	1830	417	959	167	1059
Subir escadas	3	-801	-1717	460	1950	1404	728	1208	1990

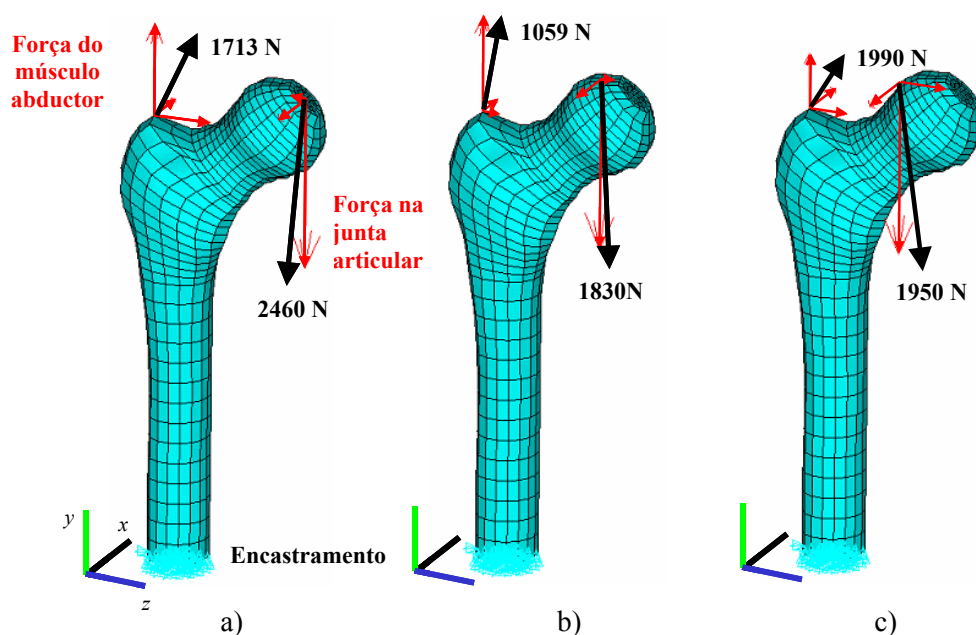


Figura 6.4. Modelo numérico do osso fêmur proximal com indicação das forças exteriores aplicadas (resultante e componentes) nas partes da junta articular e músculos, casos de carga: a) Primeiro pico de força do ciclo de marcha normal (MN); b) Segundo pico do ciclo MN; c) Pico de força na situação de subir escadas.

6.2.2. Modelo de carregamento tipo II

A situação de cargas múltiplas neste modelo de carregamento é baseada nas medições de Bergmann (1998) e Bergmann *et al.* (2001). À semelhança do modelo de cargas anterior, duas situações de actividade normal do dia a dia são consideradas, andar normalmente e subir escadas. A informação disponibilizada no CD-ROM HIP98 (Bergmann, 1998), permite aceder às curvas de força *versus* tempo (figura 6.5c) durante um ciclo de marcha normal (figura 6.5a) e subir escadas (figura 6.5b).

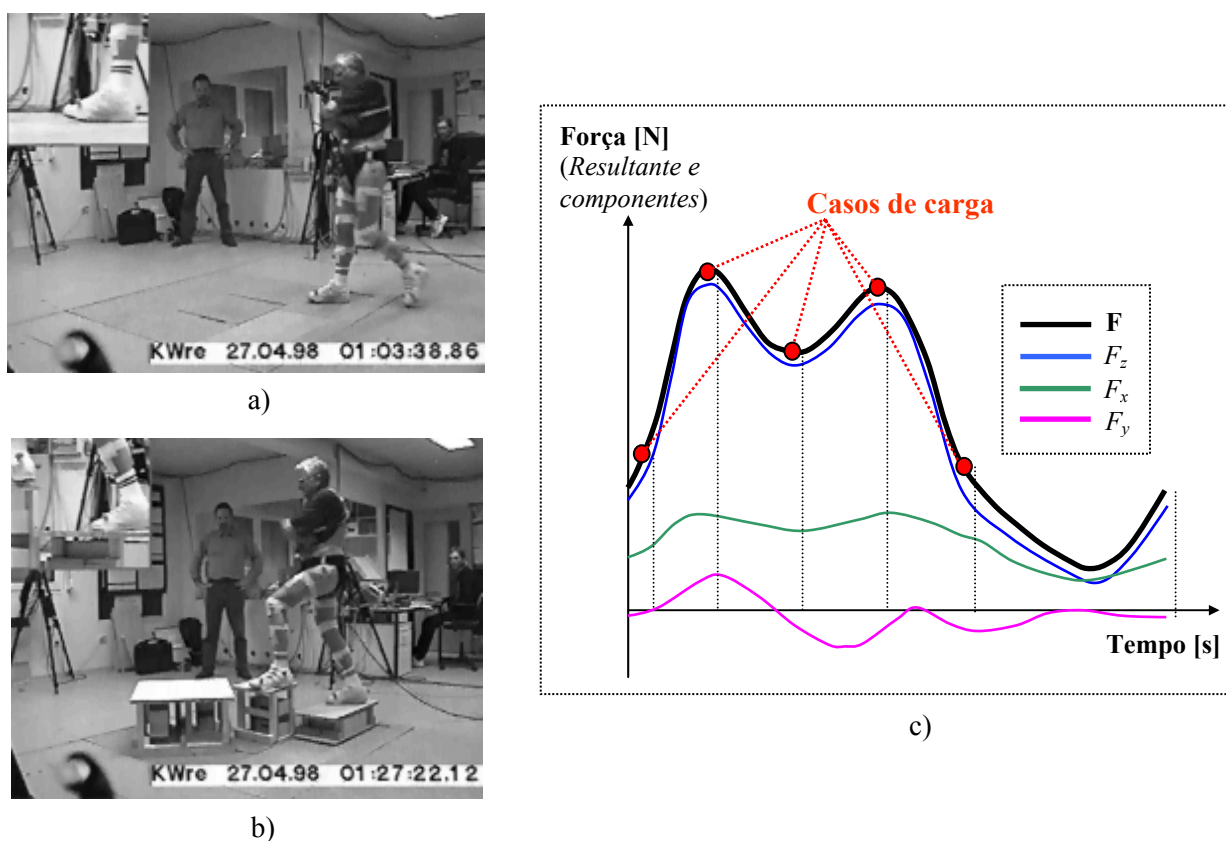


Figura 6.5. Informação contida no CD-ROM HIP98 (Bergmann, 1998): a) Vídeo de paciente instrumentado com prótese da anca para avaliação das cargas na actividade de andar normalmente; b) Medições durante a actividade de subir escadas; c) Curva típica do ciclo de marcha humana.

Em cada instante do ciclo de marcha é possível extrair os respectivos valores de intensidade e direcção das forças aplicadas na junta articular e das forças exercidas por alguns dos músculos ligados ao osso fémur. Sublinhe-se que estas medições de força na articulação da anca são aproximadas da situação da articulação natural pois para o efeito está a ser utilizada uma prótese no lugar dos componentes naturais (acetábulo/cabeça do osso fémur). Embora a distribuição de carga com uma prótese da anca não corresponda exactamente à

situação natural, esta é actualmente a única técnica *in vivo* para avaliar a intensidade daquelas forças.

O que se pretendeu com o modelo actual de carregamento foi extrapolar os pontos de aplicação e intensidade das forças aplicadas na cabeça da prótese femoral para a região da cabeça do modelo de EF do osso fémur intacto (figura 6.2). Para isso, efectuou-se um ajuste na modelação geométrica da cabeça do osso fémur na zona de aplicação da carga que corresponde à zona de contacto com o acetábulo (no osso da bacia). No modelo de EF a localização dos nós identificados com esta região de contacto foi ajustada de modo a que estes ficassem contidos numa mesma superfície esférica como se de uma cabeça protésica esferóide se tratasse. O ajuste em termos de deslocamento dos nós do modelo anatómico original (figura 6.1) para a nova posição, revelou ser mínimo o que permitiu constatar que a forma anatómica da cabeça do fémur na zona de contacto com o acetábulo é bastante próxima da forma esférica. Observe-se a forma esferizada da cabeça do fémur no modelo da figura 6.2 e compare-se com o da figura 6.4 onde o ajuste referido não foi realizado.

Posto isto, o modelo de carregamento actual considera dez casos de carga ($P = 10$). Os primeiros cinco casos de carga correspondem à actividade de andar normalmente e os cinco restantes correspondem a subir escadas. Todos os casos de carga têm igual importância (peso), $\alpha_i = 0.1$ com $i = 1, \dots, 10$. Cada caso de carga corresponde a um ponto específico da respectiva curva do ciclo de marcha durante a fase de apoio¹ (ver figura 6.5c). Na situação de andar normalmente estes pontos são seleccionados de modo a corresponderem aproximadamente a 3%, 15%, 30%, 45% e 65% do ciclo de marcha, i.e., contacto inicial do calcanhar (esquerdo) com o solo, pé oposto (direito) descola do solo (primeiro pico de força na junta articular), pé oposto (direito) passa um ponto na linha vertical da articulação esquerda da anca, contacto do calcanhar (direito) com o solo (segundo pico de força na junta articular) e pé (esquerdo) descola do solo, respectivamente. Para além da força na junta articular, cada caso de carga envolve forças musculares cujos valores são calculados de acordo com Heller *et al.* (2001). No modelo actual apenas se consideram as forças exercidas pelos músculos abdutores. Os valores das resultantes e das componentes destas forças para os 10 casos de carga podem ser consultados na tabela 6.2. Os valores das forças na junta articular são

¹ Um ciclo de marcha ou passada corresponde ao intervalo entre dois toques do mesmo calcanhar no solo. O primeiro toque corresponde ao início do ciclo (0%) e o segundo toque finaliza o ciclo (100%). Este ciclo é então dividido em duas fases: apoio (0 a 65%) e balanço (65% a 100%). A fase de apoio corresponde ao período em que o pé está em contacto com o solo. A fase de balanço corresponde ao período em que o pé não está em contacto com o solo.

extraídos dos resultados medidos para o paciente KWR (Walker) e as forças nos músculos para o NPA (paciente tipo, *i.e.*, média dos resultados medidos para vários pacientes) de acordo com Bergmann (1998) e Bergmann *et al.* (2001).

Tabela 6.2. Modelo de carregamento II. Resultante das forças aplicadas e respectivas componentes para a junta articular e músculos para cada caso de carga. Posição no ciclo de marcha (em %).

Actividade	Caso de carga	Tempo (s)	Forças na junta articular [N]				Forças dos músculos [N]			
			F_x	F_y	F_z	$ \mathbf{F} $	F_x	F_y	F_z	$ \mathbf{F} $
Andar normal Ciclo de 1.105 segundos (100%)	1	0.033 (3%)	-8.4	-1070.1	-393	1140	30.9	202.3	130.4	243
	2	0.149 (14%)	-194	-1941.2	-561	2030	35.9	723.1	484.9	871
	3	0.302 (29%)	113	-1456.3	-487	1539	-77.8	591.1	411.3	724
	4	0.497 (45%)	133	-1816	-569	1907	-92.8	459	303	558
	5	0.702 (64%)	123.7	-582.7	-398	717	—	—	—	—
Subir escadas Ciclo de 1.7 segundos (100%)	6	0.051 (3%)	-127.1	-1092	-440.4	1185	24.6	39	40.7	62
	7	0.264 (16%)	-593	-2136.1	-643.7	2308	244	720	594	965
	8	0.476 (28%)	-275.3	-1772.8	-571.7	1883	57	700	537	884
	9	0.833 (49%)	94.9	-2164.1	-585.4	2244	-17	526	330	621
	10	1.122 (66%)	102.8	-779.4	-304.7	843	—	—	—	—

A figura 6.6 tem por objectivo ajudar na visualização das forças na junta articular dadas na tabela 6.2. As direcções dessas forças podem ser aqui observadas bem como a intensidade relativa das mesmas em termos dos comprimentos dos vectores representados. Em termos do ponto de aplicação das forças na cabeça do fémur, é digno de nota, por um lado, que estas se concentram sobretudo na parte anterior-medial-superior. Por outro lado, esses pontos de aplicação (centros de pressão) encontram-se relativamente próximos uns dos outros. Isto significa que a área de transferência de carga na junta articular não tem muita variabilidade de posição aquando do movimento. Isto comprova-se também observando o reduzido leque de variação angular das direcções das forças representadas. Quanto à dimensão da área de

transferência de carga, esta ocupa uma parte de um hemisfério (ver também Pedersen *et al.*, 1997; Bergmann 1998; Bergmann *et al.*, 1984, 1995, 1999, 2001).

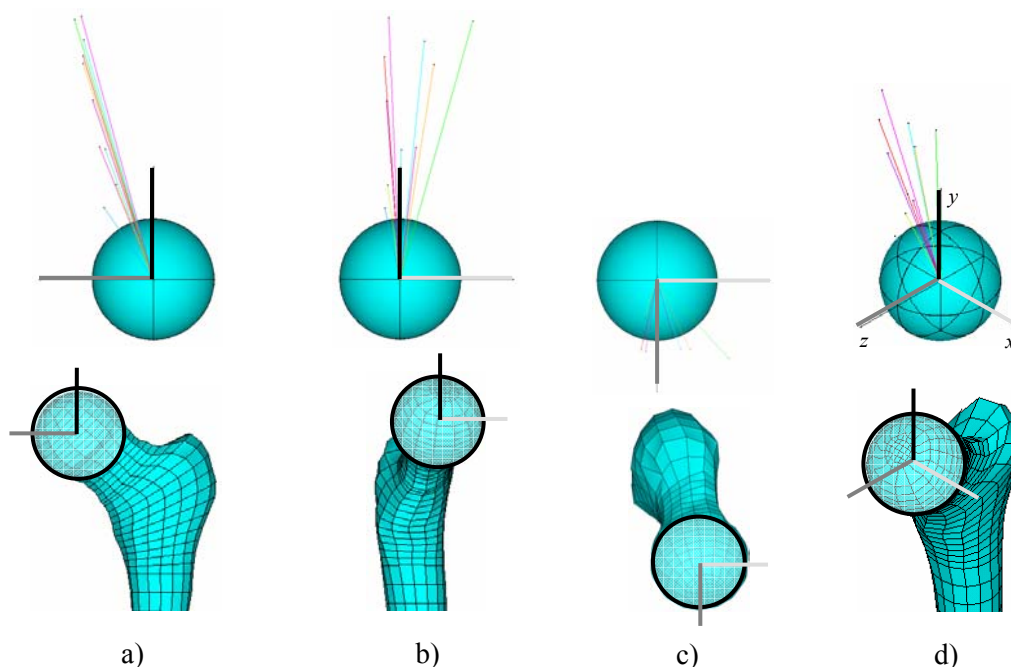


Figura 6.6. Direcção e intensidade (comprimento do vector) das forças aplicadas na cabeça do fémur (esquerdo): a) Vista anterior-posterior; b) Vista medial-lateral; c) Vista superior-inferior; d) Isométrica.

A partir da identificação dos centros de pressão (figura 6.6), a reacção do contacto com a parte acetabular é modelada de forma distribuída por uma área. Pretende-se assim evitar uma modelação pontual das cargas que na realidade não existe. Admite-se que a resultante da força na junta articular em cada instante do movimento considerado é distribuída em metade do seu valor pela área de um hemisfério (pressão aplicada a vermelho na figura 6.7) sendo a outra metade transferida através de forças aplicadas em nós pertencentes a uma área localizada desse hemisfério (forças a azul na figura 6.7). As figuras 6.7 e 6.8 apresentam esta modelação de carga distribuída para as situações de pico de força em andar normal (segundo caso de carga) e pico de força em subir escadas (sétimo caso de carga), respectivamente. Além disso, estas figuras apresentam as condições de fronteira de deslocamento imposto na base da metáfise. A figura 6.8 referente à actividade de subir escadas serve também o propósito de mostrar uma componente da força que de forma bem evidente se projecta para fora do plano frontal. Efectivamente, o maior momento tursor aplicado ao osso fémur é aquando desta actividade.

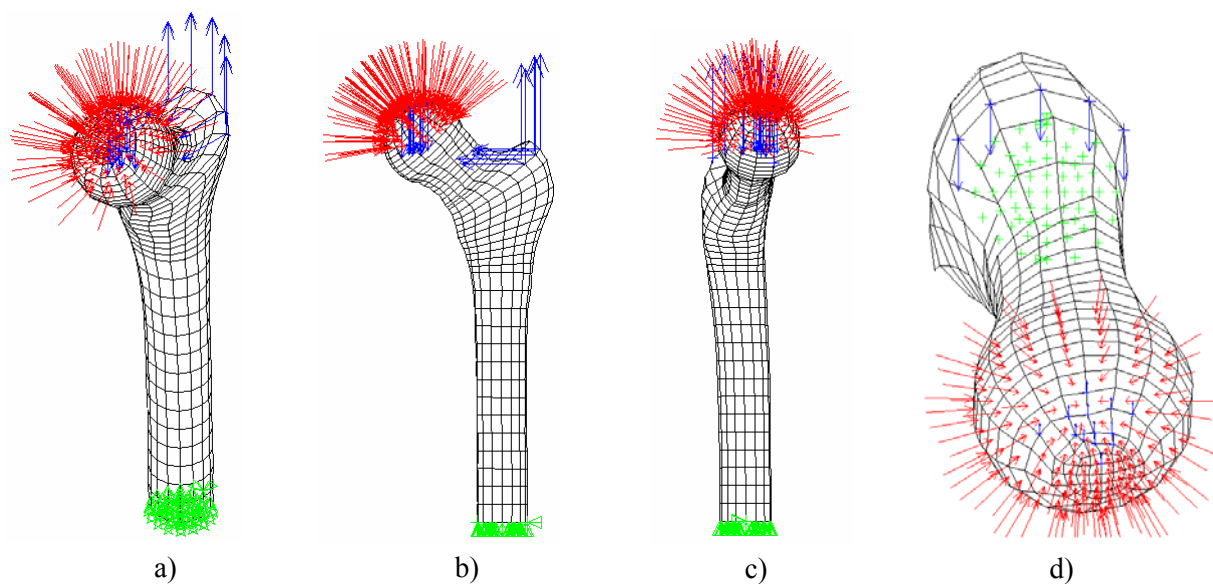


Figura 6.7. Modelo numérico do osso fêmur (esquerdo) com condições de fronteira de força/pressão imposta na cabeça do fêmur e deslocamento imposto na base da diáfise para o caso de carga 2 (primeiro pico de força na situação de andar normal). Representadas várias vistas: a) Isométrica; b) Anterior-posterior; c) Medial-lateral; d) Superior-inferior.

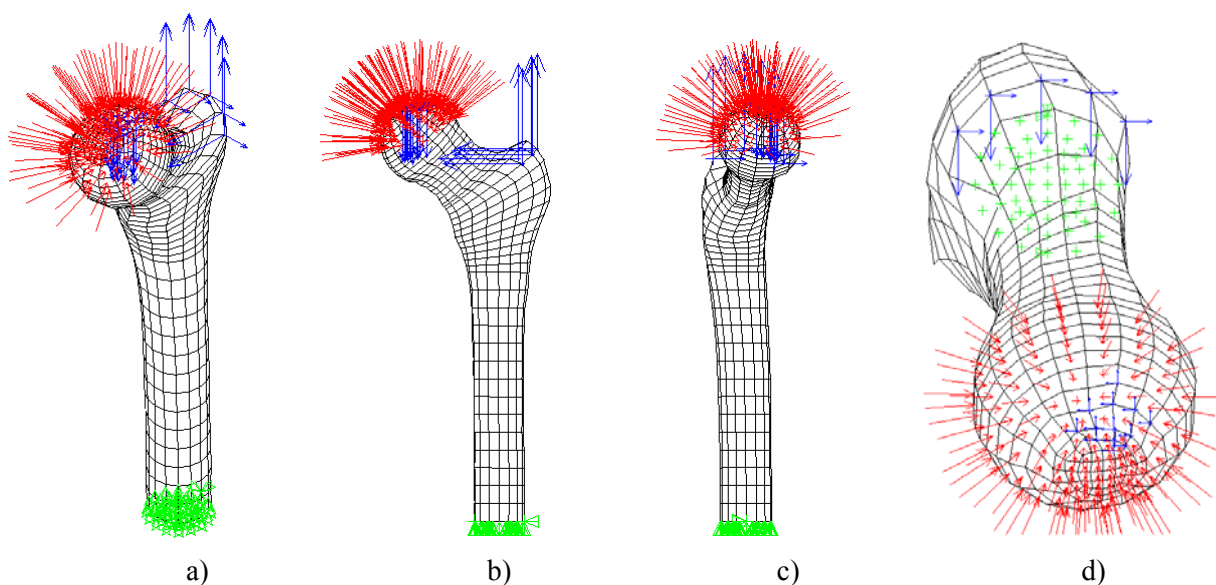


Figura 6.8. Modelo numérico do osso fêmur (esquerdo) com condições de fronteira de força/pressão imposta na cabeça do fêmur e deslocamento imposto na base da diáfise para o caso de carga 7 (primeiro pico de força na situação de subir escadas). Representadas várias vistas: a) Isométrica; b) Anterior-posterior; c) Medial-lateral; d) Superior-inferior.

Visto que as forças na junta articular em vez de serem aplicadas de forma pontual são aplicadas de forma distribuída através de pressões nos elementos e forças distribuídas por vários nós, torna-se necessário verificar se as componentes da força resultante aplicada correspondem de facto aos valores da tabela 6.2. Para fazer esta verificação basta apenas executar uma análise de EF com o modelo de cargas distribuídas na junta articular e verificar a solução de reacção nos nós de deslocamento imposto. A tabela 6.3 mostra que os valores da resultante e componentes da reacção medida nos nós constrangidos aproximam muito bem a resultante e componentes da força medida experimentalmente (comparem-se os valores de $|\mathbf{F}|$ na tabela 6.2 com os de $|\mathbf{R}|$ na tabela 6.3).

Tabela 6.3. Reacções às forças/pressões aplicadas na cabeça do fémur em cada um dos casos de carga.

Actividade	Caso de carga	Reacção à carga aplicada na junta articular [N]			
		R_x	R_y	R_z	$ \mathbf{R} $
Andar normal	1	8.32	1061.4	404.4	1136
	2	196.5	1936.3	576.8	2030
	3	-108.7	1451.7	500.3	1539
	4	-131.1	1804.5	602.7	1907
	5	-116.3	562.5	398.2	699
Subir escadas	6	134	1090.3	443.4	1185
	7	616.2	2126.7	651.8	2308
	8	230	1782.2	560.7	1882
	9	-123.5	2136.9	667.1	2242
	10	-108.3	770.3	324.6	843

A modelação das cargas exteriores aplicadas sobre o osso, o conhecimento das intensidades e direcções dessas cargas e sua influência no processo de remodelação óssea são campos de investigação desafiadores porém, cruciais, pois o osso é extremamente sensível ao ambiente mecânico envolvente. Esta dissertação deixa em aberto um estudo mais aprofundado neste domínio com o modelo de remodelação óssea actual. No entanto, são dignos de nota alguns trabalhos de investigação já efectuados sobre o efeito das forças musculares na remodelação óssea (ver Duda, 1996, 1997; Duda *et al.*, 1996; 1998; Taylor *et al.*, 1996; Bitsakos *et al.*, 2005; Crowninshield e Brand, 1981; Dostal e Andrews, 1981; Stolk *et al.*,

2001; Heller *et al.*, 2001; Pedersen *et al.*, 1997; Brand *et al.*, 1982; 1986; Cristofolini *et al.*, 1995). Em termos gerais, nestes trabalhos os autores concluem que poucos músculos, para além dos abdutores, exercem uma influência significativa na adaptação óssea.

6.3. Distribuição de densidade aparente e microestruturas

Nesta secção apresentam-se os resultados de distribuição de densidade aparente e microestruturas obtidos com o modelo hierárquico de remodelação óssea considerando os dois modelos de carregamento da secção 6.2 e os diversos factores influentes na arquitectura interna do osso apresentados na secção 5.3.3.

6.3.1. Sem constrangimentos locais

Neste caso o problema resolvido obedece estritamente à formulação dada por (5.1) e (5.2), ou seja, não se introduzem quaisquer constrangimentos adicionais ao nível local ou da microestrutura. Considera-se o modelo de osso fémur proximal apresentado na figura 6.4 e o respectivo modelo de carregamento (tipo I – secção 6.2.1).

Na figura 6.9a observa-se a malha de elementos finitos do fémur e a distribuição de densidade aparente. Na figura 6.9b representa-se a densidade aparente no interior do osso recorrendo a um plano coronal médio. Nesta figura sobressai a camada de osso compacto envolvente (zona a preto), a cavidade medular está bem identificada, a zona interior caracterizada por uma escala de cinzento corresponde a osso trabecular mais ou menos denso e na zona da epífise femoral consegue-se identificar o *triângulo de Ward* (zona anatómica típica caracterizada por densidade muito baixa). Para alguns elementos seleccionados da parte proximal do fémur (indicados na figura 6.9c) é apresentada a microestrutura na figura 6.10. Nesta figura as microestruturas são representadas como um padrão periódico em vez de célula única.

As microestruturas obtidas permitem caracterizar a anisotropia do osso trabecular em diferentes regiões anatómicas. De um modo geral os resultados obtidos concordam com as idealizações de microestrutura trabecular apresentadas em outros estudos como, por exemplo, em Gibson (1985) e Gibson e Ashby (1988), ver também secção 5.3.3.1.

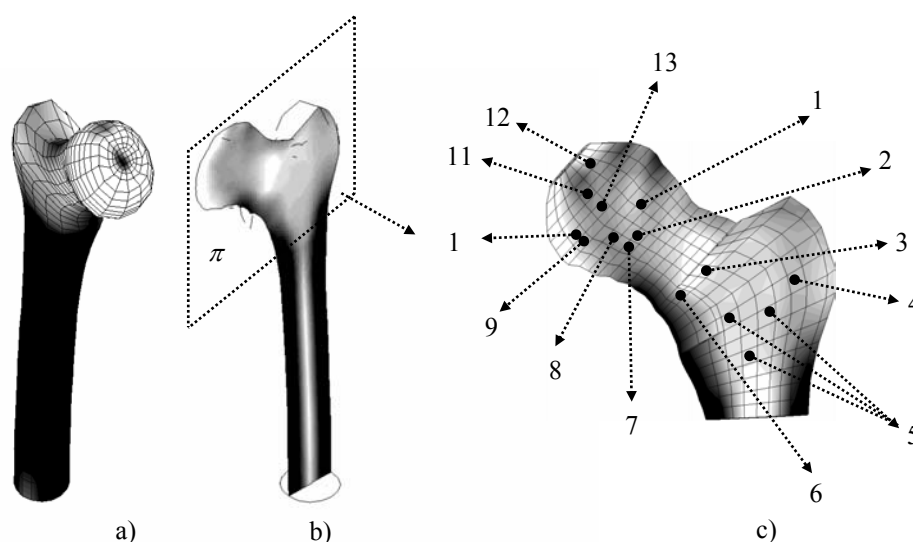


Figura 6.9. Distribuição de densidade aparente; a) Malha de EF do fémur; b) Secção intermédia do fémur; c) Secção proximal vista no plano π e selecção de EF (ver Coelho *et al.*, 2007c).

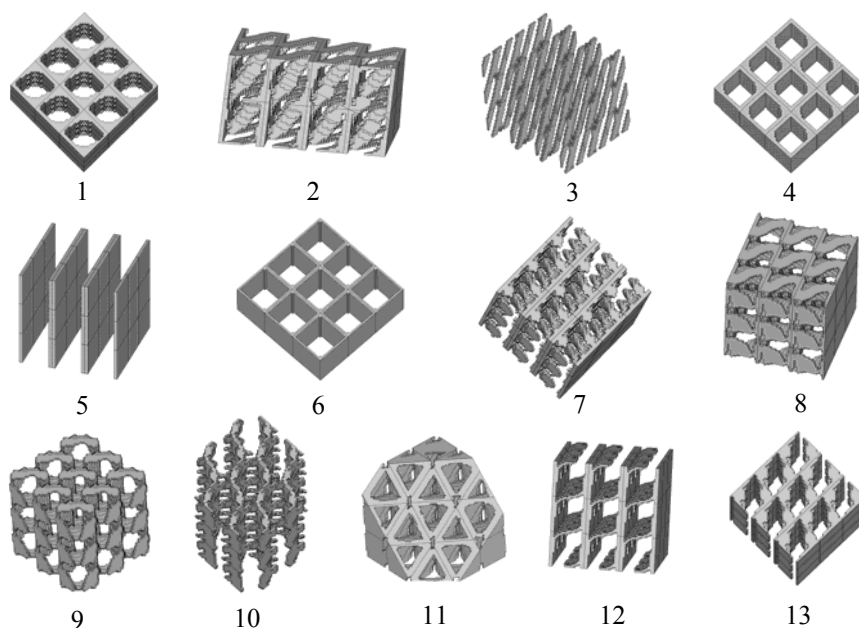


Figura 6.10. Microestruturas vistas nos EF seleccionados da figura anterior (ver Coelho *et al.*, 2007c).

Em regiões onde domina um estado de tensão triaxial mais ou menos elevado surgem microestruturas tendencialmente equiaxiais mais ou menos densas (exemplos 2, 8, 9, 10, 11 na figura 6.10). Onde a densidade é maior a microestrutura tem analogia com as placas ou paredes perfuradas de uma caixa, onde é menor tem analogia com uma estrutura do tipo reticulada, *i.e.*, de barras ligadas entre si. O comportamento mecânico nestas regiões do osso é mais próximo do isotrópico.

Em contraste, existem regiões onde a microestrutura é fortemente orientada segundo uma direcção do espaço – microestrutura anisotrópica. As microestruturas nestes casos têm semelhança com células prismáticas em favo de abelha (estado de tensão uniaxial, exemplos 1, 4, 6) ou placas dispostas paralelamente e ligadas por barras na direcção normal (estado de tensão biaxial, exemplo 5).

As figuras 6.11 e 6.12 agrupam os resultados das microestruturas basicamente em dois grandes grupos, microestruturas com comportamento mais próximo do isotrópico e microestruturas fortemente orientadas em alguma orientação no espaço (elevado grau de anisotropia), respectivamente. Nestas figuras faz-se acompanhar a geometria de cada microestrutura pelo correspondente gráfico de anisotropia que foi obtido seguindo o procedimento descrito na secção 2.5.4 e utilizando o software MATLAB.

Os resultados de microestrutura concordam com outros trabalhos que concluem que o osso não é simplesmente o óptimo da rigidez (Sigmund, 1999). Várias microestruturas de rigidez maximizada mostradas apresentam “paredes” fechadas ou pelo menos é essa a tendência na distribuição do material para determinados estados de tensão e fracções volúmicas (exemplos 8 e 11 na figura 6.10). Daqui resulta que outros factores para além da rigidez devem desempenhar um papel importante na arquitectura trabecular do osso.

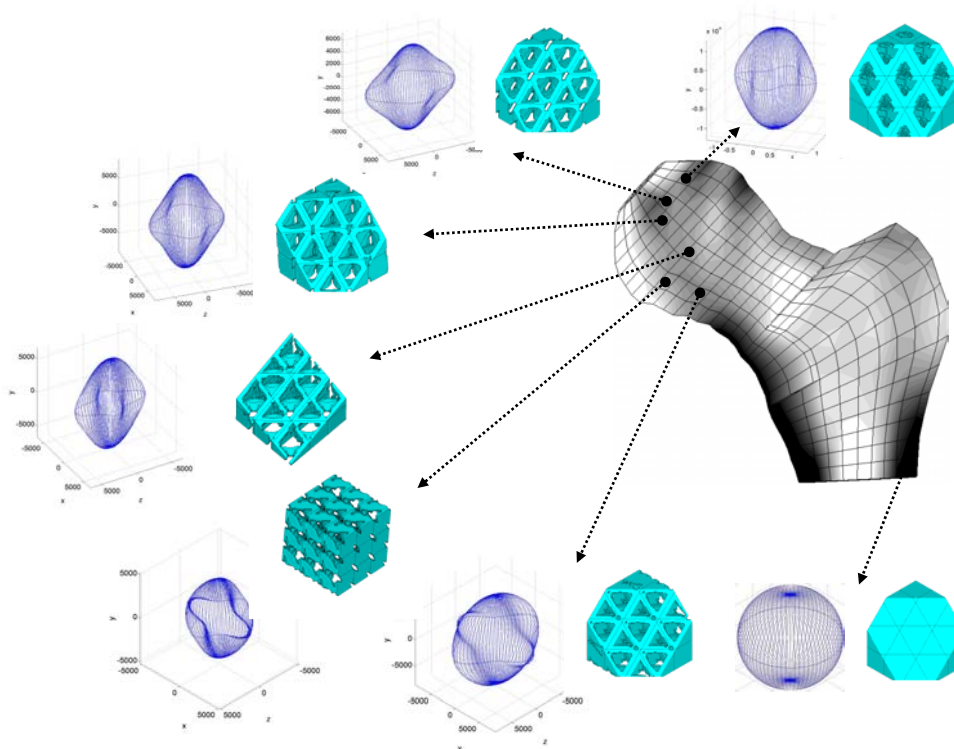


Figura 6.11. Microestruturas e representação da respectiva anisotropia para as regiões (EF) anatómicas seleccionadas (neste caso a anisotropia é baixa).

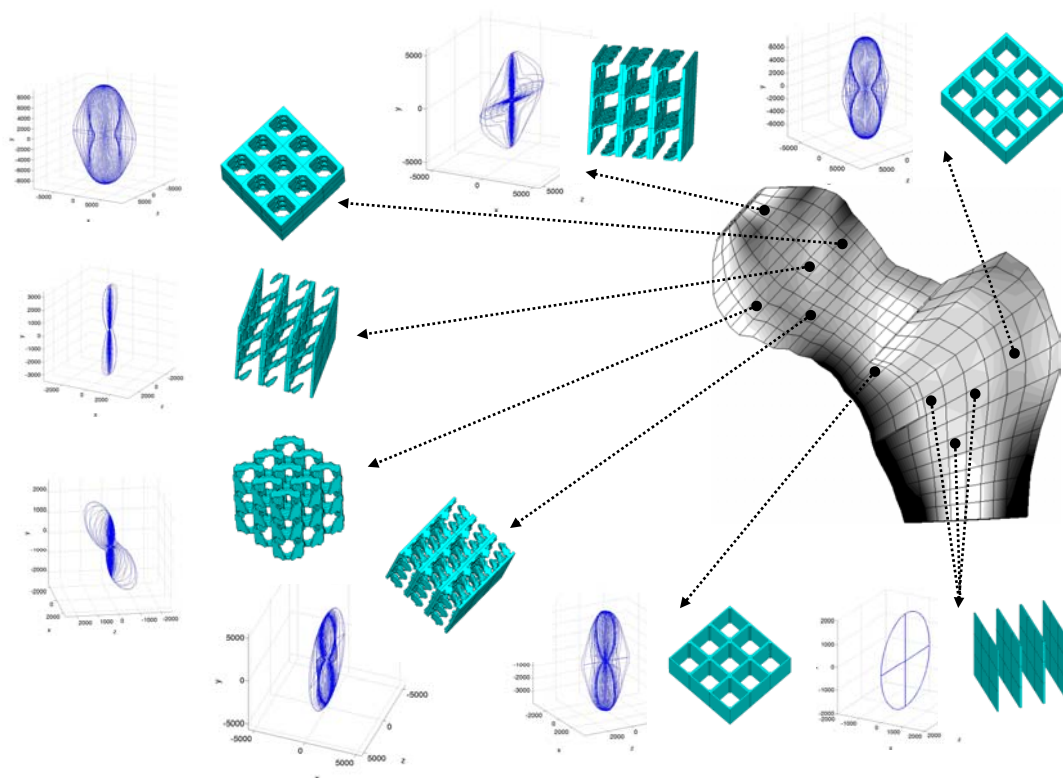


Figura 6.12. Microestruturas e representação da respectiva anisotropia para as regiões (EF) anatómicas seleccionadas (neste caso a anisotropia é elevada).

6.3.2. Influência da porosidade e do tipo de carregamento

Os resultados anteriores mostram regiões de densidade relativa $\rho = 1$ identificadas com o osso compacto. Nestes casos todas as densidades microscópicas μ no domínio da célula atingem o valor limite superior de variação igual a 1. Estas soluções de material sólido isotrópico podem ser encaradas como uma primeira aproximação para o osso cortical. Contudo, este tipo de tecido ósseo nem é completamente denso nem isotrópico, mas sim um meio poroso com 5%-10% de porosidade e, em geral, em termos de propriedades mecânicas, é considerado transversalmente isotrópico (ver secção 5.3.3.2).

Com o objectivo de melhor aproximar a microestrutura real do osso cortical (especialmente a modelação da porosidade vascular, veja-se Cowin, 1999), um nível mínimo de porosidade é assegurado pelo modelo proposto através de uma diminuição do valor limite superior de variação da densidade macroscópica, $\rho_{\text{máx}} < 1$. É usado um valor mínimo de 7.5% de porosidade na modelação do osso compacto, ou seja, $\rho_{\text{máx}} = 0.925$.

Assume-se um material de base sólido e isotrópico com Módulo de Elasticidade de 20GPa e coeficiente de Poisson de 0.3 (Kabel *et al.*, 1999). Deve ser sublinhado que estas propriedades do material de base correspondem às propriedades do tecido ósseo mineralizado (modela o tecido ósseo trabecular e estrutura lamelar da matriz óssea do osso cortical). A densidade verdadeira do tecido mineralizado é aproximadamente constante em todo o osso compacto e osso trabecular (Cárter e Beaupré, 2001). O osso trabecular é constituído por uma rede de poros interconectados (espaço intertrabecular) e por uma combinação de pequenos elementos (barras) de estrutura densa e mineralizada ligados entre si. O osso cortical é essencialmente uma matriz mineralizada atravessada por canais (sistema Haversiano).

O esquema de interpolação entre as propriedades do material base e a densidade microscópica é o SIMP com expoente igual a 4. Uma vez que a distribuição de densidades microscópicas seja conhecida no domínio da célula, as propriedades equivalentes, quer para o osso trabecular ou cortical, são obtidas pelo método da homogeneização, levando em conta a organização microestrutural de cada tipo de tecido ósseo.

A figura 6.13 apresenta os resultados de densidade aparente (média dos valores nodais) obtidos levando em conta a porosidade do osso compacto. Ao nível macroscópico os resultados são muito semelhantes aos apresentados na figura 6.9. Tal como já foi comentado no caso da figura 6.9, na figura 6.13c podem ser identificadas regiões típicas também encontradas no osso real.

Os resultados de microestruturas em diferentes regiões anatómicas são apresentados na figura 6.14. Topologias de microestruturas semelhantes a estas na região do osso trabecular são apresentadas na figura 6.10. Note-se que os EF seleccionados nas figuras 6.10 e 6.14 não são exactamente os mesmos para dar uma melhor ideia da diversidade das soluções locais obtidas. Essencialmente, as diferenças de resultados entre a secção anterior e a actual residem nas soluções de osso compacto conforme destacado na figura 6.15 (compare-se com a solução de osso compacto na figura 6.11).

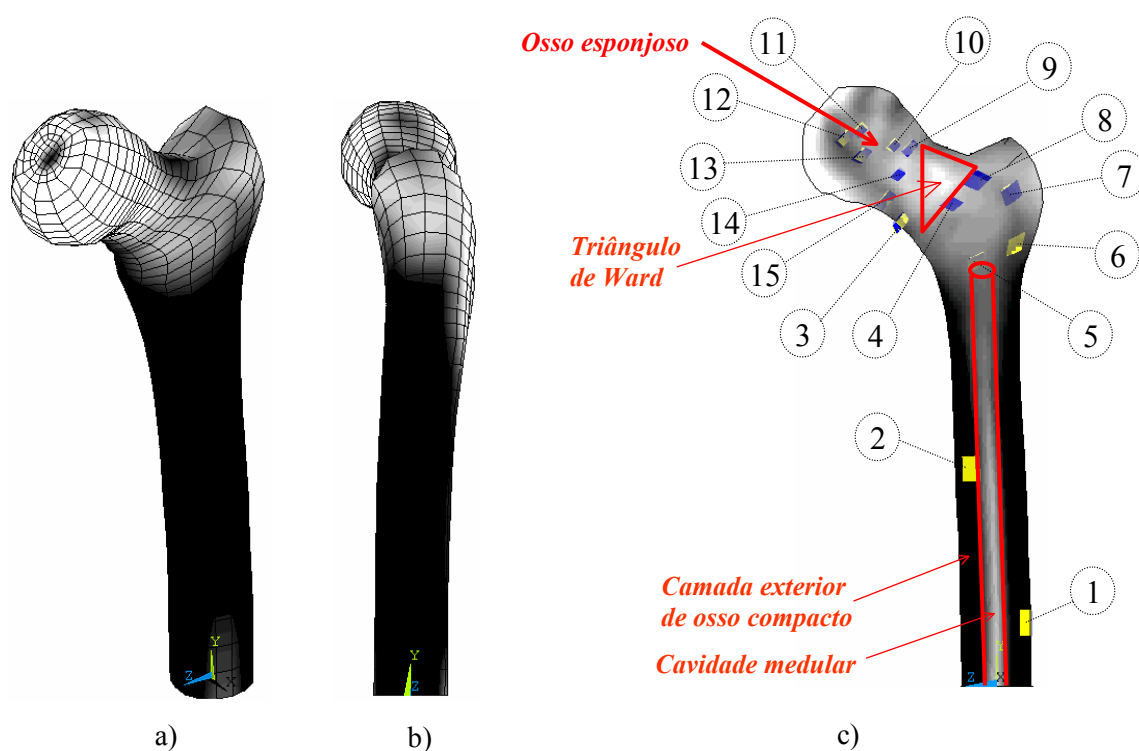


Figura 6.13. Densidade aparente; vistas: a) Isométrica; b) Lateral; c) Coronal (ver Coelho *et al.*, 2007d).

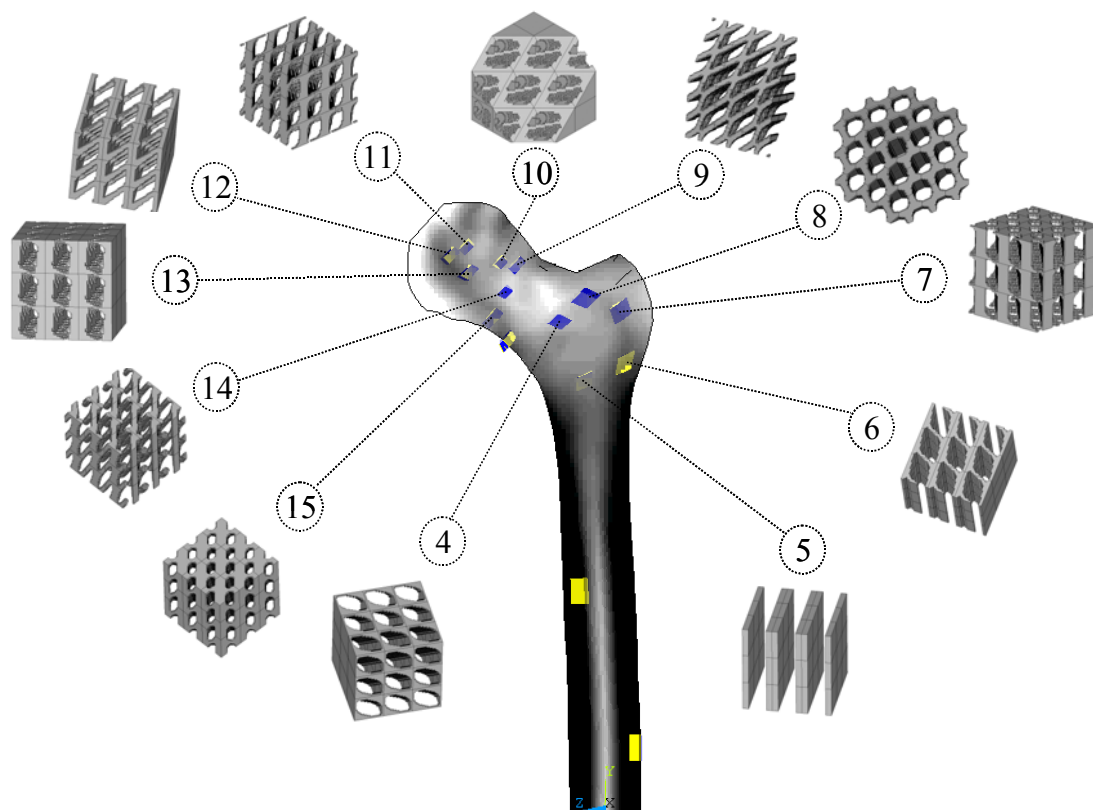


Figura 6.14. Distribuição de densidade aparente e visualização de microestruturas para os elementos finitos seleccionados (ver Coelho *et al.*, 2007d).



Figura 6.15. Soluções de microestrutura para o osso compacto (ver Coelho *et al.*, 2007d).

A figura 6.16 apresenta um gráfico caracterizando a anisotropia medida na solução numérica para o osso compacto. Conforme observado e calculado, o modelo de osso compacto apresenta um comportamento mecânico transversalmente isotrópico embora o quociente entre o módulo de elasticidade longitudinal e transversal seja aproximadamente de 1.3 (18MPa/14MPa), ligeiramente inferior ao valor medido experimentalmente.

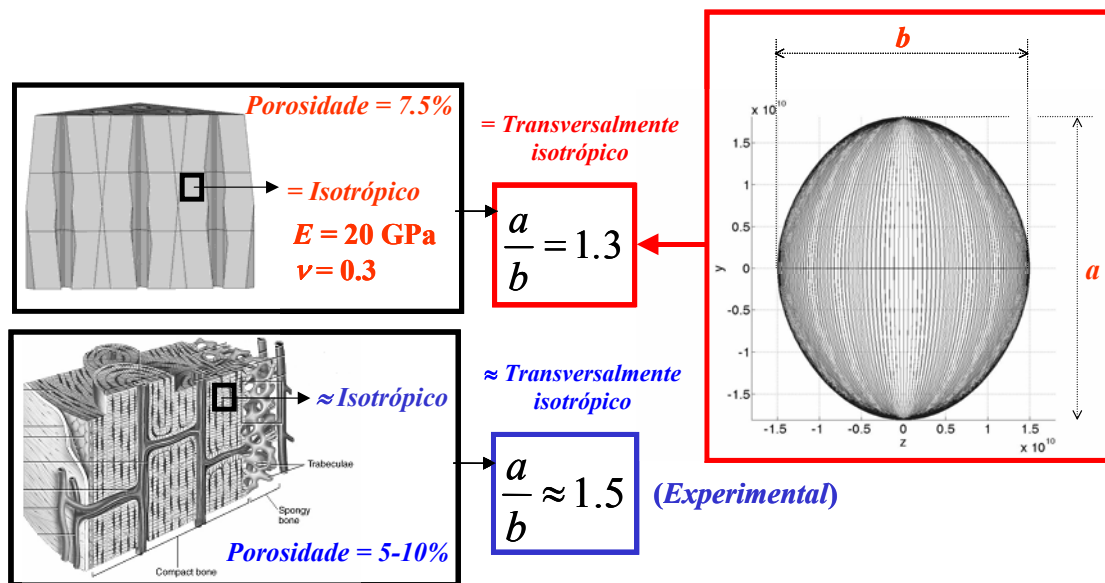


Figura 6.16. Medidas de anisotropia para o osso compacto. Resultados obtidos através do modelo hierárquico e através de experimentação. Esquematização da hipótese de material base sólido e isotrópico para a matriz mineralizada do osso compacto.

A figura 6.17 sistematiza o que foi referido anteriormente sobre a modelação do tecido ósseo trabecular através dum modelo de material base sólido isotrópico. Conforme se evidencia a hipótese de isotropia está apenas associada ao material base. A microestrutura resultante representativa da arquitectura trabecular é anisotrópica.

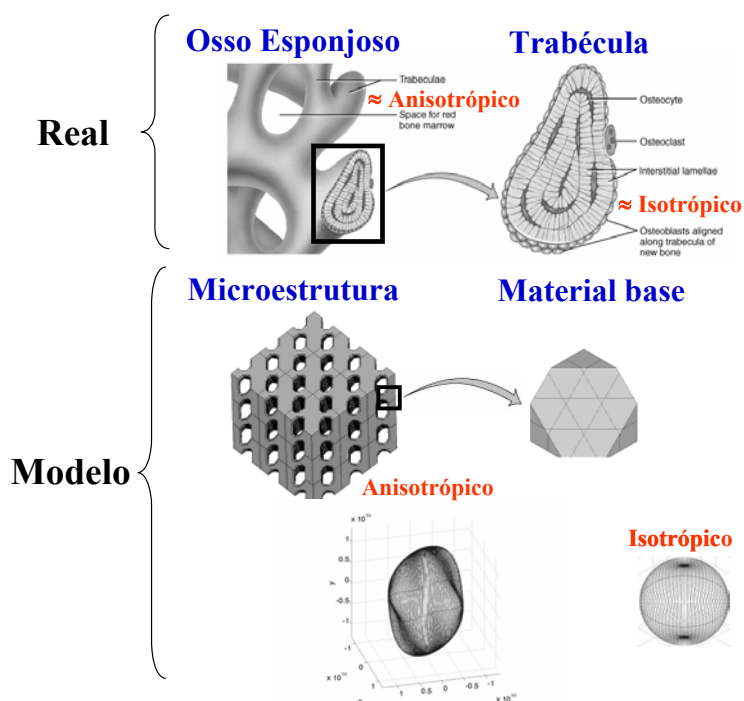


Figura 6.17. Esquema da hipótese de material base sólido e isotrópico para o tecido ósseo trabecular.

Os resultados apresentados nas figuras anteriores foram obtidos com o modelo de carregamento I (secção 6.2.1). Conforme referido anteriormente, um carregamento de forças tão fiel à realidade quanto possível é imperativo em modelos de remodelação óssea pois o osso é um material vivo em constante processo de adaptação de extrema sensibilidade ao ambiente mecânico envolvente. Embora a distribuição de densidade aparente apresentada reproduza as características anatómicas principais de um fémur proximal no plano médio coronal, os resultados pioram para fora desse plano, nomeadamente no córtex do lado posterior. Isto resulta da simplicidade do carregamento aplicado que não favorece tanto o aparecimento de efeitos tridimensionais na passagem dos esforços internos (basicamente a distribuição de densidade concentra-se num plano médio). O carregamento tipo II caracterizado por uma maior diversidade de cargas aplicadas em intensidade e direcção, aplicadas de forma distribuída, possibilita o aparecimento de mais zonas de material (em ambos os lados do córtex), ver figura 6.18. A figura 6.19 procura evidenciar melhor este resultado mostrando um varrimento dos resultados da densidade na direcção anterior-

posterior. Observe-se também através da figura 6.18f uma melhor definição das zonas anatómicas típicas do fémur proximal: triângulo de Ward, região trabecular, cavidade medular e camada de osso compacto (comparar com figura 6.13c).

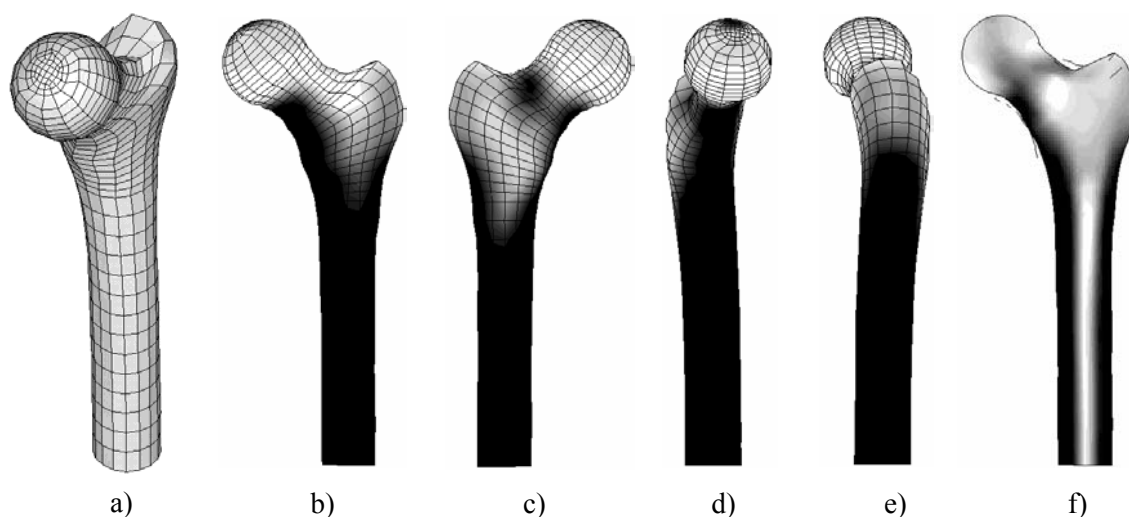


Figura 6.18. a) Malha de EF global. Distribuição de densidade aparente (média dos valores nodais). Diferentes vistas: b) Posterior-anterior; c) Anterior-posterior; d) Medial-lateral; e) Lateral-medial; f) Secção intermédia coronal ou frontal.

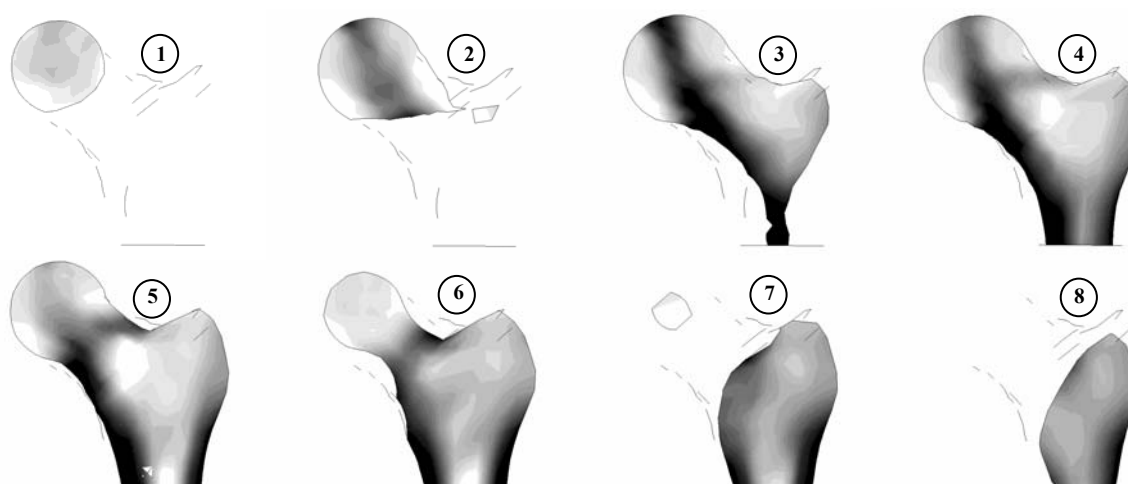


Figura 6.19. Varrimento do campo de densidade aparente na zona proximal do modelo do osso fêmur.

6.3.3. Influência da densidade de área de superfície

Os resultados nesta secção são apresentados também em Coelho *et al.* (2008b, 2009b). Os resultados numéricos com controlo de superfície, ou seja, o problema 5.2 tem um constrangimento adicional conforme descrito na secção 5.3.3.3, são comparados com aqueles

obtidos sem controlo de superfície conforme apresentado na secção anterior (modelo de carregamento II). À escala macroscópica as diferenças na distribuição de densidade aparente com e sem controlo de superfície parecem ser insignificantes (comparem-se as figuras 6.20a e 6.20b). Os valores da função objectivo (*compliance*) para estas duas situações diferem apenas de 0.7%.

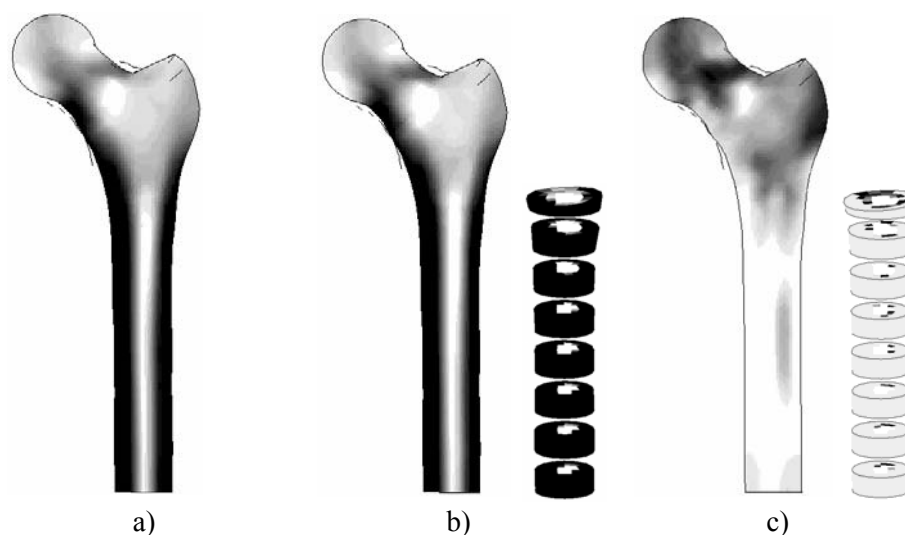


Figura 6.20. Vista da secção intermédia coronal: a) Distribuição de densidade **sem** controlo de superfície; b) Distribuição de densidade **com** controlo de superfície (vista tridimensional da diáfise para identificação da cavidade medular); c) Distribuição de superfície quando esta é controlada (extraída de Coelho *et al.*, 2009b).

Além disso, a figura 6.20c apresenta a distribuição da superfície no domínio do osso (vista coronal intermédia) identificando as zonas da metáfise e epífise com os maiores valores de superfície, o que está de acordo com a realidade visto que o osso trabecular apresenta um maior quociente superfície/volume.

À escala microscópica o efeito do controlo de superfície é bem mais perceptível nos resultados obtidos (veja-se figura 6.21). Estes resultados devem ser comparados com os da figura 6.22 obtidos sem controlo de superfície (note-se que as microestruturas são apresentadas para os mesmos elementos finitos seleccionados). Esta figura apresenta um conjunto de microestruturas que são solução do problema hierárquico de remodelação óssea resolvido com constrangimento de porosidade e carregamento tipo II. Basicamente, da comparação destas microestruturas fica claro que quando o controlo de superfície está activo as microestruturas apresentam uma maior área de superfície aproximando-se assim mais da arquitectura real do osso trabecular. Em geral, sem controlo de superfície as microestruturas

tendem a exibir uma falta de conectividade (caso dos laminados) enquanto que, com controlo de superfície, as topologias obtidas apresentam-se mais convolutas e consequentemente com algumas propriedades de conectividade melhoradas.

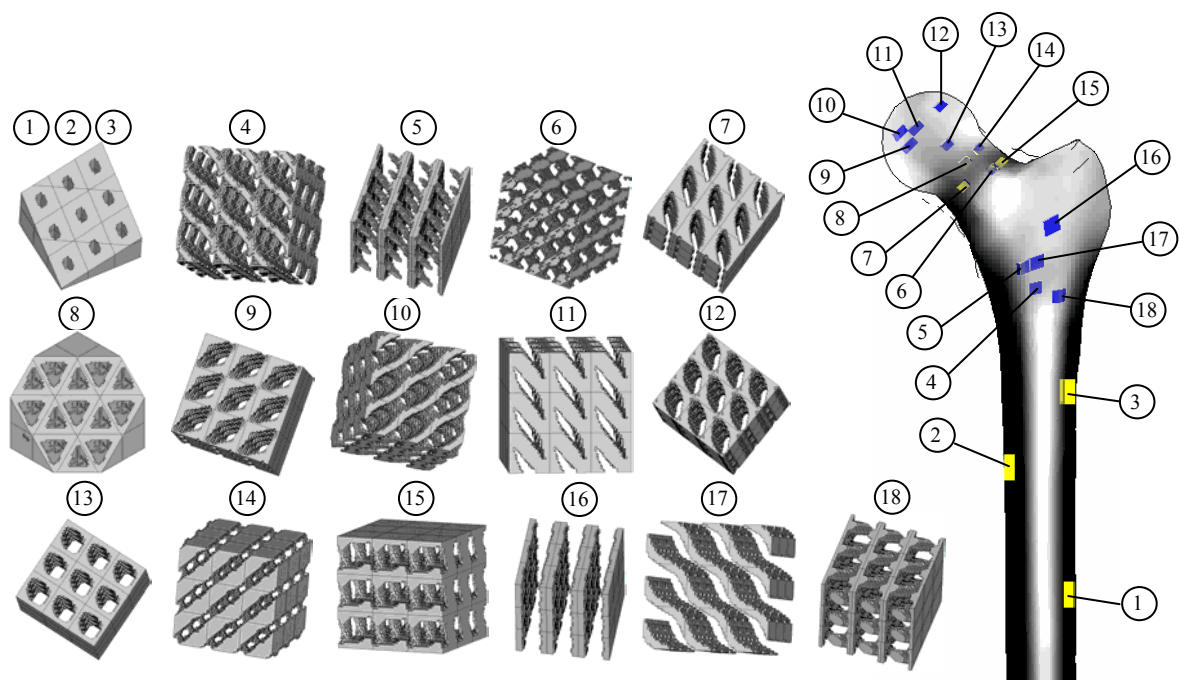


Figura 6.21. Microestruturas obtidas em diferentes localizações anatómicas. Resultados **com** controlo de superfície (extraída de Coelho *et al.*, 2009b).

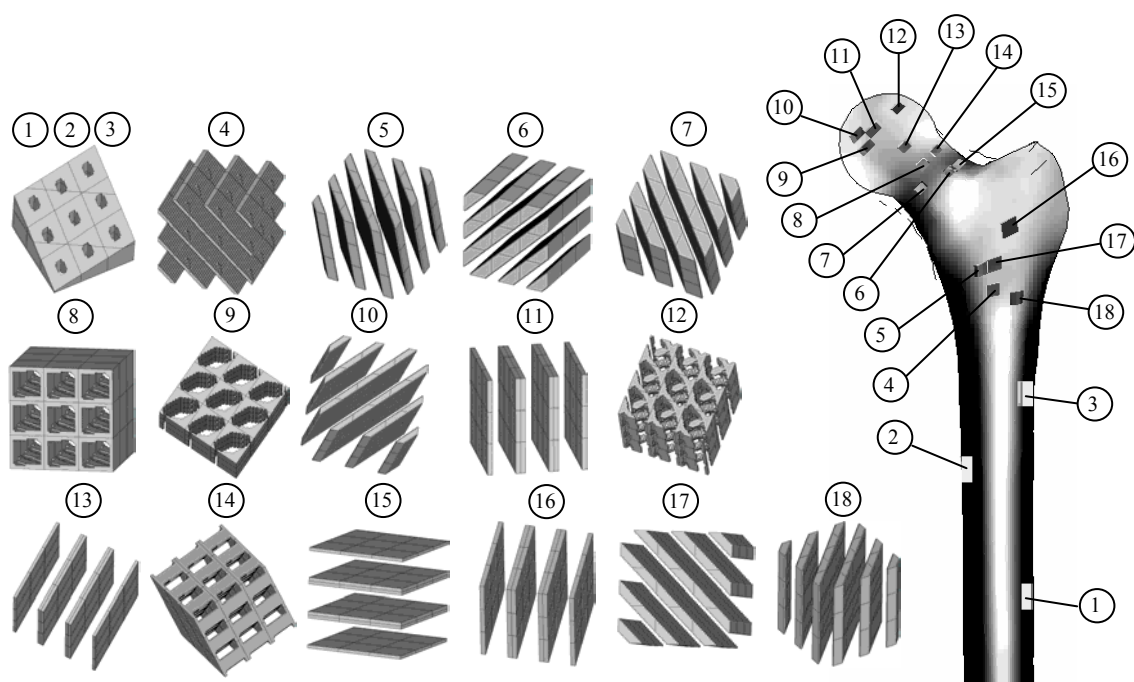


Figura 6.22. Microestruturas obtidas nos elementos finitos seleccionados **sem** controlo de superfície (extraída de Coelho *et al.*, 2009b).

Com o objectivo de destacar a influência do controlo de superfície nos resultados macroscópicos, subdivide-se o intervalo de variação da densidade relativa, $[0,1]$, em trinta sub-intervalos e representa-se graficamente o número relativo (%) de elementos finitos macroscópicos com valores de densidade dentro de cada um desses sub-intervalos (ver figura 6.23).

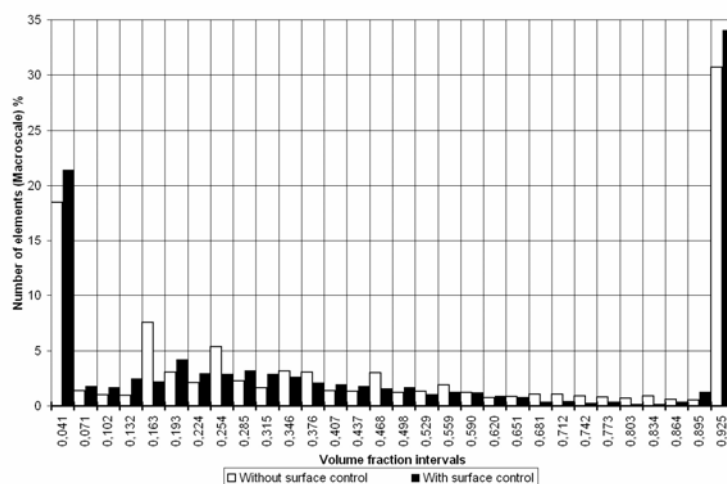


Figura 6.23. Contagem do número de elementos finitos macroscópicos [%] existentes dentro de cada um dos sub-intervalos da densidade relativa macroscópica (extraída de Coelho *et al.*, 2009b).

Na figura 6.23 observa-se que quando o controlo de superfície está activo a distribuição resultante é mais regular. Para além disso, a distribuição dos valores das fracções volúmicas é fisiologicamente mais consistente. Conforme se sabe, dois tipos de tecido ósseo coexistem (cortical e trabecular) mas existe uma grande diferença entre eles em termos de fracção volúmica. O osso trabecular apresenta valores de fracção volúmica até 0.5 enquanto o osso compacto apresenta valores tipicamente acima de 0.9. Portanto, existe como que um “vazio” nas fracções volúmicas de osso entre 0.5 e 0.9, ou seja, a transição de osso trabecular para cortical é de certa forma abrupta. O modelo hierárquico com controlo de superfície reflecte mais esta realidade biológica.

A figura 6.24a apresenta a curva de referência para controlo da superfície (curva a negrito) adoptada nesta dissertação. A figura 6.24b permite inferir acerca da optimalidade da estrutura do osso. Quando a superfície não é controlada, uma nuvem de pontos é obtida tipicamente abaixo da curva de referência S_v^* que é reproduzida na figura 6.24b para a situação da superfície ser controlada. Isto sugere novamente que o osso não se comporta como uma estrutura mecânica simplesmente otimizada para a rigidez estrutural. É digno de nota que

apesar da dispersão dos pontos nesta nuvem, estes parecem ter a tendência de se agrupar em curvas características. Estas tendências de distribuição podem ser comparadas com alguns modelos analíticos para o osso trabecular assumindo microestruturas simplificadas para a caracterização do osso trabecular (barra, placa, placa + barra, barra 3D, inclusão esférica, veja-se *e.g.* Fazzalari *et al.*, 1989). Por exemplo, os pontos arrumados num patamar visível na figura 6.24b com $S_v = 1.333$ correspondem a um modelo de osso tipo placa. Contudo, a arquitectura do osso não apresenta simplesmente “placas” paralelas, na realidade estas são “placas perfuradas” ligadas entre si através de pequenas “barras” (ver figura 5.11).

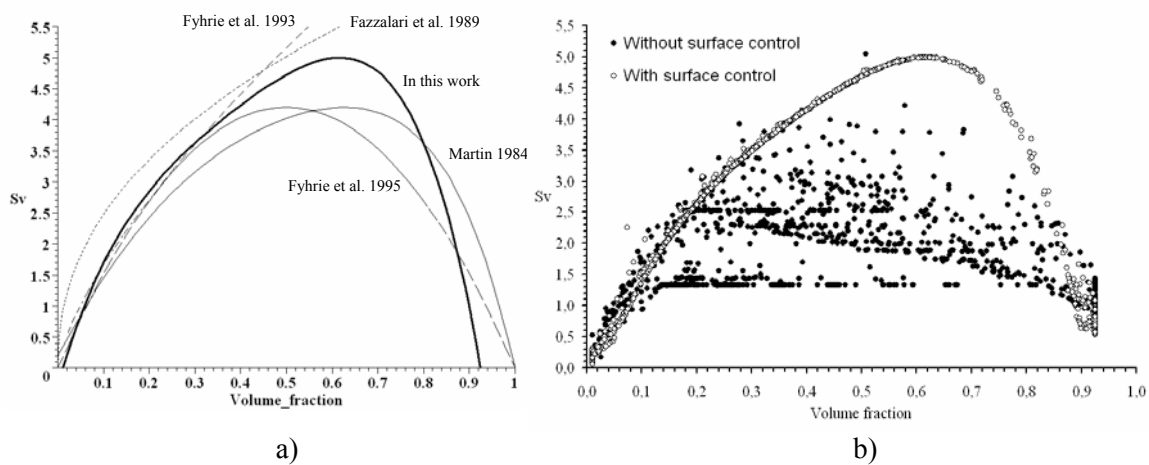


Figura 6.24. Gráfico de densidade de área de superfície de osso [mm^2/mm^3] em função da fracção volumica: a) Curvas da literatura e a usada nesta dissertação para controlo da superfície (a negrito); b) Resultados numéricos com e sem controlo de superfície (extraída de Coelho *et al.*, 2009b).

6.3.4. Influência da permeabilidade intertrabecular

Na lei de remodelação óssea, à semelhança do que foi feito para a densidade de área de superfície de osso, a permeabilidade intertrabecular é introduzida como um critério local para conduzir o processo de adaptação óssea. Tal como referido na secção 2.5.3.2, é forçada uma permeabilidade mínima em todas as direcções espaciais impondo uma restrição de simetria de ortotropia no tensor da permeabilidade (a isotropia pode surgir como caso particular, ou seja, quando as três componentes da diagonal do tensor forem iguais).

Para cada componente da diagonal do tensor é imposto um mesmo valor mínimo que pode variar com a densidade macroscópica mediante uma determinada função f_i representada graficamente na figura 6.25. Três funções são consideradas nesta secção. A função f_1 é mais parecida com a função empírica da figura 5.13 embora os valores de permeabilidade não

sejam comparáveis pois num caso mostram-se valores relativos e no outro absolutos. A função f_2 é outra função exponencial embora mais restritiva em termos dos valores de permeabilidade mínima exigidos. A função f_3 é uma relação linear entre permeabilidade e densidade obrigando a valores mínimos de permeabilidade nas microestruturas ainda mais elevados. O objectivo da utilização destas três curvas é perceber a influência do constrangimento de permeabilidade nas soluções global e local do modelo de remodelação óssea.

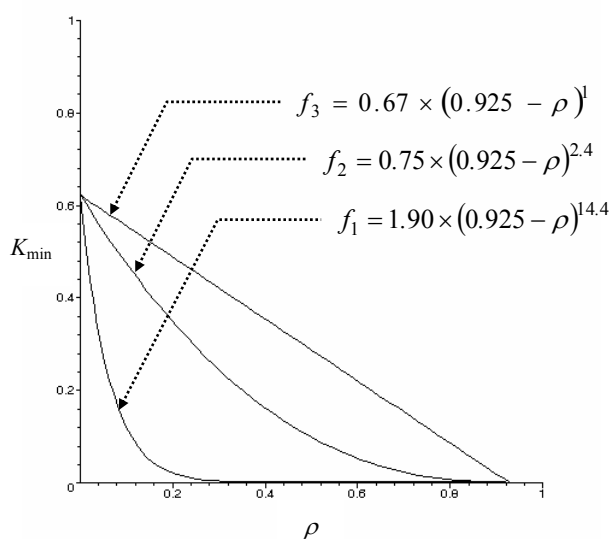


Figura 6.25. Funções utilizadas para definir o requisito mínimo da permeabilidade como função da densidade aparente.

Considera-se que as descrições dos problemas da elasticidade (fase sólida) e de escoamento de potencial (fase fluida) não são afectadas ou constrangidas pelos efeitos de interacção entre as duas fases sólida e fluida, ou seja, a pressão do fluido não deforma o sólido nem a deformação do sólido pressuriza o fluido.

Os resultados de distribuição de densidade aparente obtidos com cada uma das funções de permeabilidade mínima f_i e sem este constrangimento são apresentados na figura 6.26. Observa-se que, à parte de uma ligeira densificação de f_1 para f_3 , não existem grandes diferenças quando se comparam entre si os resultados obtidos com o constrangimento de permeabilidade. Quando se comparam estes resultados com a situação não constrangida também se observam poucas diferenças. Em termos do valor da função objectivo os resultados das figuras 6.26a, 6.26b, 6.26c e 6.26d correspondem a 0.611J, 0.611J, 0.616J e 0.621J, respectivamente.

Os resultados de distribuição de permeabilidade apresentados na figura 6.27 para uma

secção frontal intermédia do fêmur proximal permitem avaliar diferenças significativas quando se comparam as simulações de remodelação óssea levando em conta ou não o controlo de permeabilidade nas microestruturas. Aqui, regiões de permeabilidade nula (0%) e máxima (100%) são identificadas por branco e preto, respectivamente. A escala de cinzento mostra valores intermédios da permeabilidade. Tornam-se bem evidentes diferenças de distribuição de permeabilidade representada pela componente K_{11} , ou seja, permeabilidade na direcção normal ao plano frontal (direcção anterior-posterior), ver figura 6.27a.

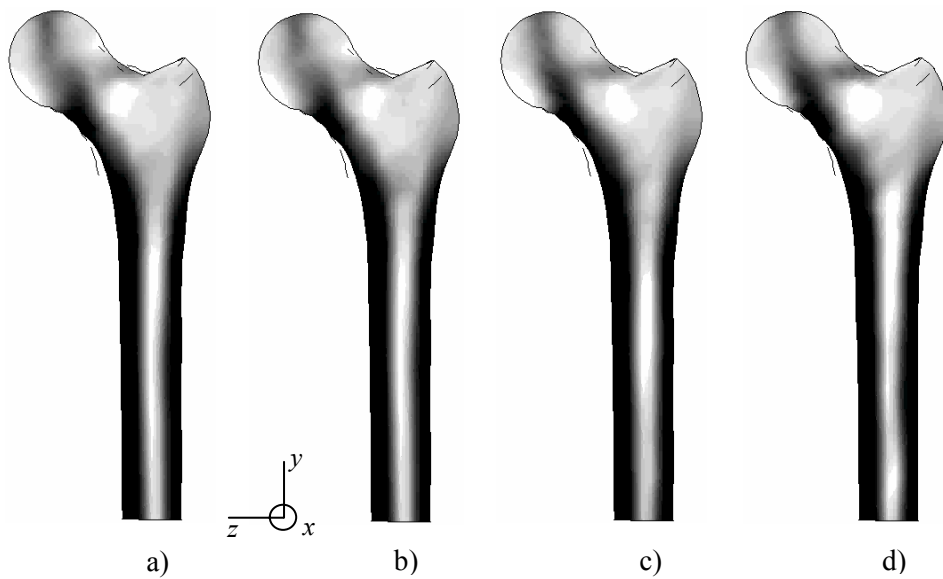


Figura 6.26. Distribuição da densidade aparente: a) Sem constrangimento de permeabilidade; b) Permeabilidade mínima dada por f_1 ; c) Permeabilidade mínima dada por f_2 ; d) Permeabilidade mínima dada por f_3 (funções $f_i, i=1, \dots, 3$ definidas na figura 6.25).

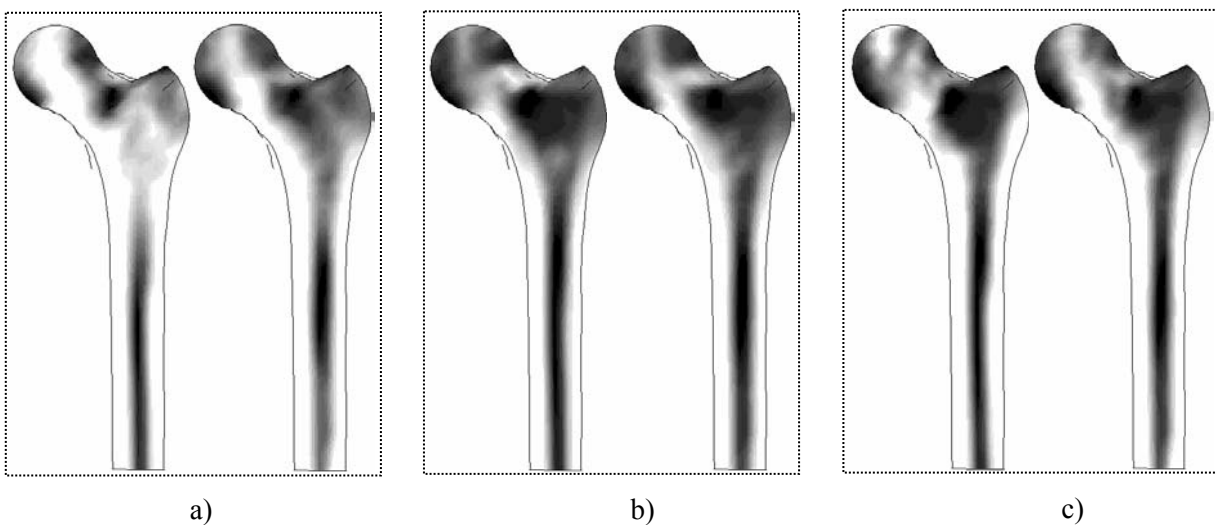


Figura 6.27. Comparação dos resultados de distribuição de permeabilidade (componentes K_{ii}) entre as situações de problema não constrangido (imagem da esquerda) e constrangido na permeabilidade com função f_2 (imagem da direita): a) Componente K_{11} ; b) Componente K_{22} ; c) Componente K_{33} .

Embora nesta secção a densidade de superfície óssea não seja utilizada como critério local de remodelação óssea, torna-se interessante medir esta quantidade para efeitos comparativos entre as situações de controlo da permeabilidade e sem esse controlo. Assume-se a célula de base com as mesmas dimensões características utilizadas na secção anterior. A figura 6.28a mostra a distribuição de densidade de superfície obtida sem controlar a permeabilidade das microestruturas. As figuras 6.28b, 6.28c e 6.28d mostram as distribuições obtidas com a permeabilidade controlada pelas funções f_1 , f_2 e f_3 , respectivamente.

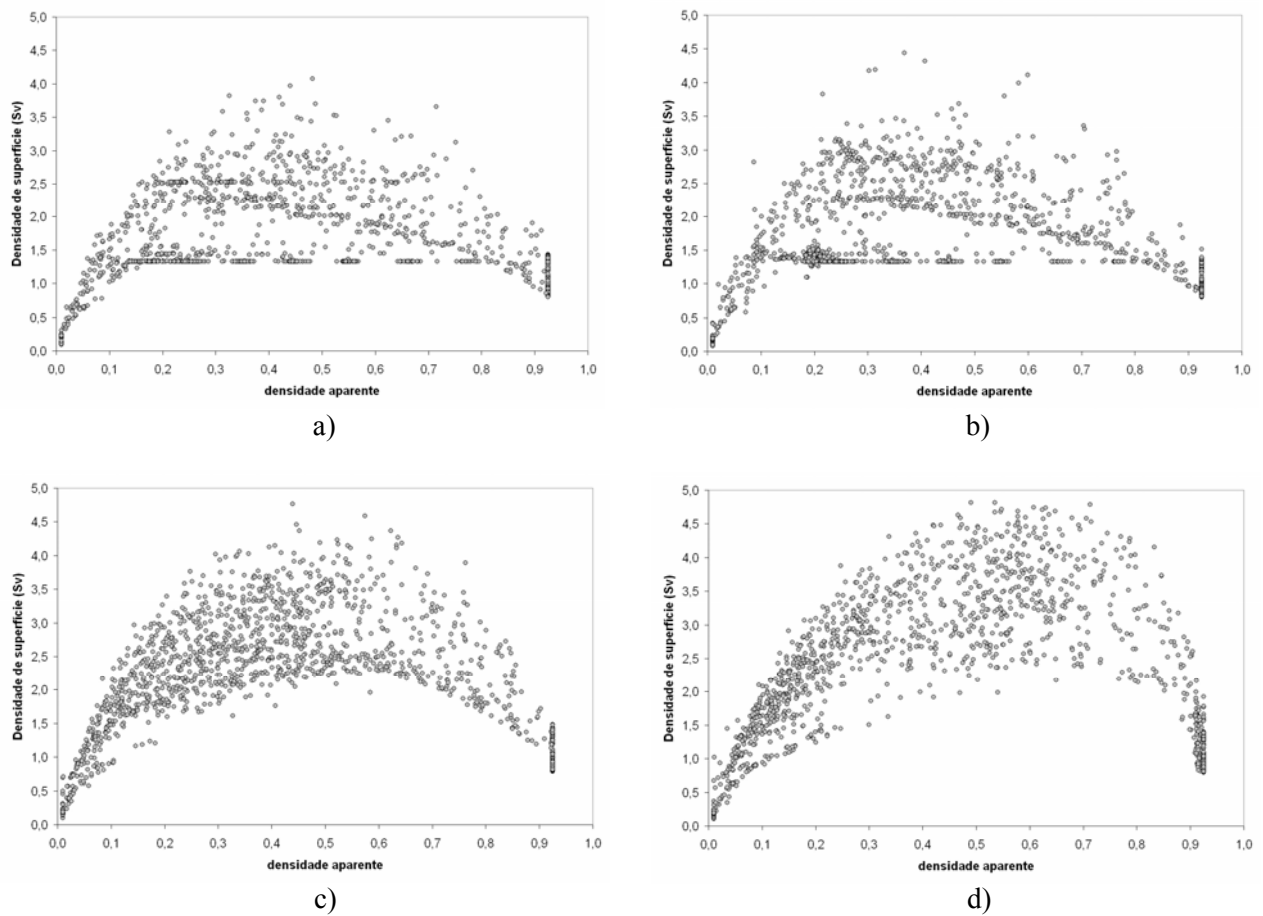


Figura 6.28. Distribuição da densidade de área de superfície de osso em função da densidade aparente para as diferentes funções f_i de permeabilidade mínima consideradas: a) Sem constrangimento de permeabilidade; b) Com função de permeabilidade mínima f_1 ; c) Com função f_2 ; d) Com função f_3 .

A distribuição inicial da figura 6.28a não traduz a realidade do osso conforme já concluído anteriormente através da figura 6.24b. No entanto, os restantes resultados da figura 6.28, permitem agora observar de forma interessante como a distribuição de densidade de superfície de osso parece ser naturalmente reproduzida utilizando apenas a permeabilidade como critério local controlado. Para tornar este aspecto mais evidente, a figura 6.29 mostra as mesmas

distribuições de permeabilidade controlada da figura 6.28 e, para cada uma delas, acrescenta de forma sobreposta a representação gráfica da função polinomial interpoladora da nuvem pontos (ajustamento obtido pelo método dos mínimos quadrados utilizando o MATLAB).

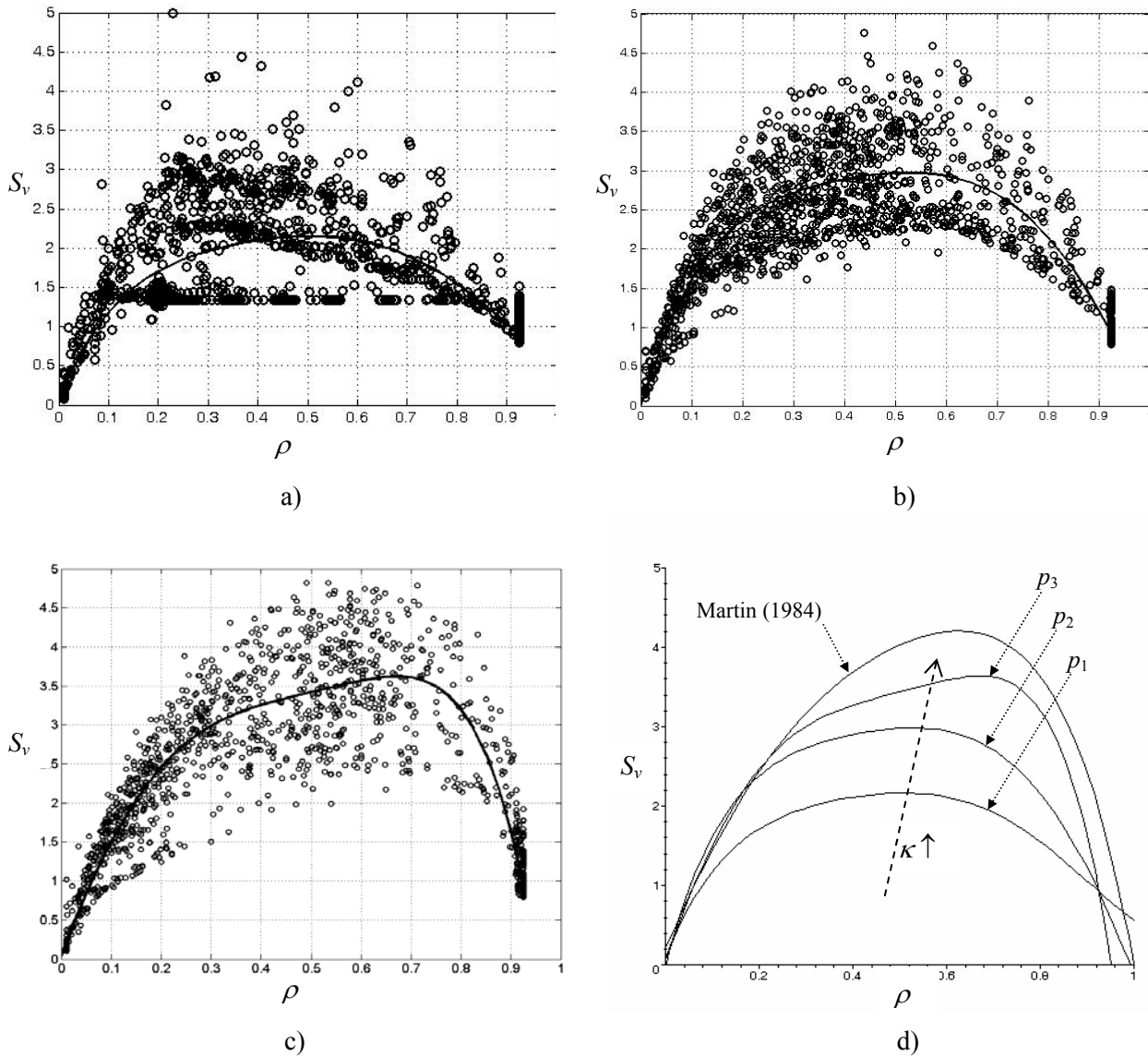


Figura 6.29. Funções polinomiais interpoladoras das distribuições de densidade de área de superfície trabecular mostradas na figura 6.28: a) Com função de permeabilidade mínima f_1 ; b) Com função f_2 ; c) Com função f_3 ; d) Todas as funções interpoladoras são comparadas com a curva de Martin (1984).

A figura 6.29d compara os polinômios interpoladores com a distribuição de Martin (1984). Isto permite concluir que um aumento da permeabilidade mínima requerida (sentido de f_1 para f_3) parece aproximar melhor a distribuição de Martin (1984). Neste caso considerou-se uma função interpoladora dada por um polinômio do quinto grau,

$$p(\rho) = s_1 + s_2\rho^1 + s_3\rho^2 + s_4\rho^3 + s_5\rho^4 + s_6\rho^5 \quad (6.1)$$

onde os coeficientes s_i são dados na tabela 6.4.

Tabela 6.4. Coeficientes dos polinômios de interpolação das densidades de área de superfície de osso representados graficamente na figura 6.29.

Polinômio	s_1	s_2	s_3	s_4	s_5	s_6
$p_1(\rho)$	0.067	15.324	-51.969	99.004	-96.954	35.081
$p_2(\rho)$	-0.020	22.571	-75.815	136.030	-120.31	37.421
$p_3(\rho)$	0.044	16.783	-19.946	-38.131	112.54	-73.497
Martin (1984)	0.200	13.500	-9.900	-18.000	43.000	-28.800

As distribuições dos valores das componentes da diagonal do tensor da permeabilidade para cada elemento finito macroscópico como função da densidade aparente são apresentadas nos gráficos da figura 6.30.

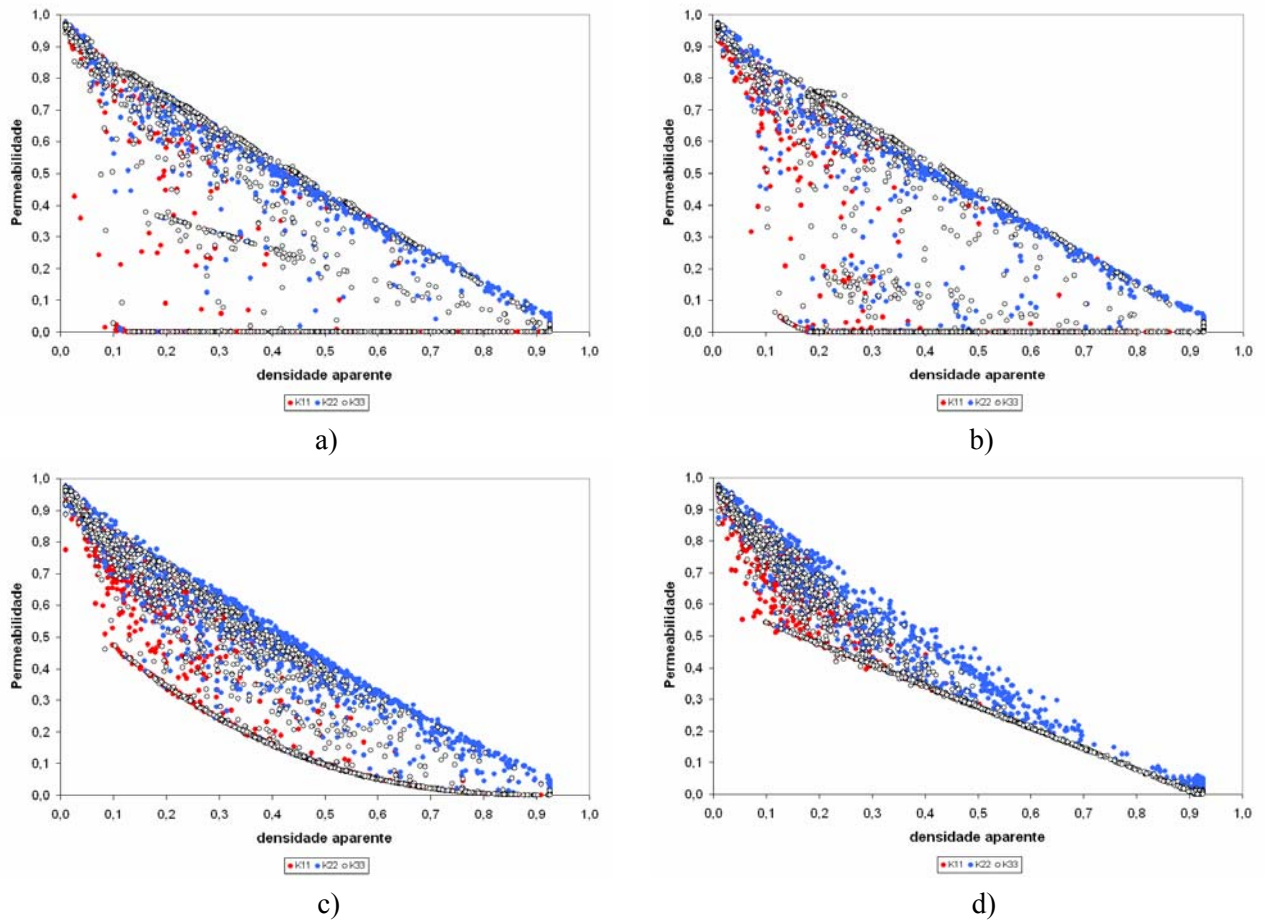


Figura 6.30. Gráfico das componentes da diagonal do tensor da permeabilidade em função da densidade aparente: a) Sem constrangimento de permeabilidade; b) Com função de permeabilidade mínima f_1 ; c) Com função f_2 ; d) Com função f_3 .

No caso de permeabilidade não controlada (apenas medida), a figura 6.30a torna bem evidente, por um lado, uma quantidade de soluções que são caracterizadas por exibirem uma permeabilidade nula em pelo menos uma direcção. De entre estas soluções encontram-se os laminados (permeabilidade nula na direcção perpendicular ao plano da lâmina). Por outro lado, torna-se também evidente uma relação linear entre a permeabilidade máxima medida e a densidade aparente. Este resultado é uma evidência da existência de limites teóricos que podem ser calculados para materiais de microestrutura com duas fases (sólido/vazio). Por exemplo, Hashin e Shtrikman (1962) deduziram limites teóricos de permeabilidade isotrópica para materiais compósitos de duas fases (sólido/vazio) misturando materiais de base isotrópicos, ver figura 6.31. No entanto, os resultados da figura 6.30 correspondem a soluções de permeabilidade com menor restrição de simetria, ou seja, permeabilidade ortotrópica (K_{ii} 's podem ser diferentes). Por este motivo, as permeabilidades máximas encontradas na figura 6.30 poderão ainda apresentar valores superiores aos limites teóricos da figura 6.31. Este é efectivamente o caso da figura 6.30a onde os valores máximos encontrados se situam sobre uma mesma recta correspondendo a soluções de microestrutura de geometria bastante regular onde a permeabilidade é tipicamente dependente de uma dimensão geométrica (espessura no caso dos laminados).

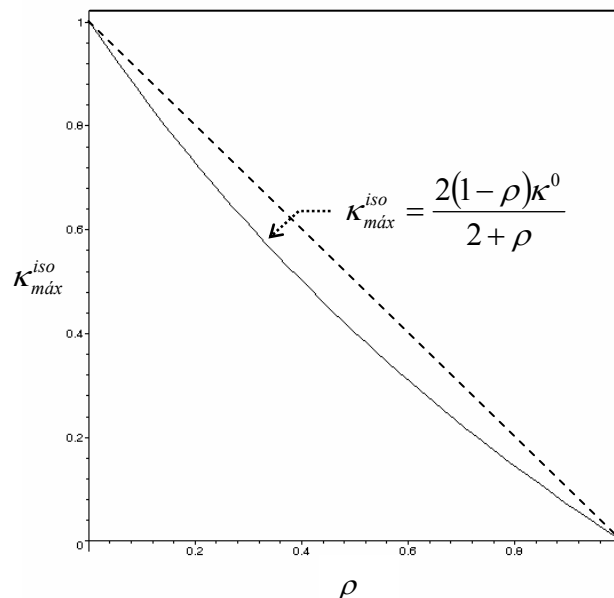


Figura 6.31. Limites teóricos de permeabilidade isotrópica segundo Hashin e Shtrikman (1962).

As distribuições nas figuras 6.30b, 6.30c e 6.30d recuperam em parte as funções f_i do requisito mínimo de permeabilidade permitindo assim verificar que o constrangimento de permeabilidade está activo em várias soluções óptimas locais. Visto que este é um

constrangimento do tipo “maior ou igual”, as distribuições obtidas não se encontram todas sobre uma mesma linha mas exibem alguma dispersão que, contudo, pode ser inscrita num determinado envelope. Tipicamente, esse envelope circunscreve as soluções, inferiormente pelo valor da função do constrangimento e, superiormente, por uma distribuição aproximadamente linear entre os pontos de máxima densidade (permeabilidade nula) e máxima permeabilidade (densidade nula). As distribuições dos valores máximos de permeabilidade nestas figuras sugerem mais uma vez uma aproximação a limites teóricos da permeabilidade.

Um tipo de gráfico semelhante ao apresentado na figura 6.30 pode ser gerado calculando a norma euclidiana das componentes da diagonal do tensor da permeabilidade conforme equação (5.8). A figura 6.32 mostra as representações gráficas das normas correspondentes às distribuições mostradas na figura 6.30. Torna-se bem observável uma diminuição do carácter linear da distribuição quando a permeabilidade mínima exigida aumenta.

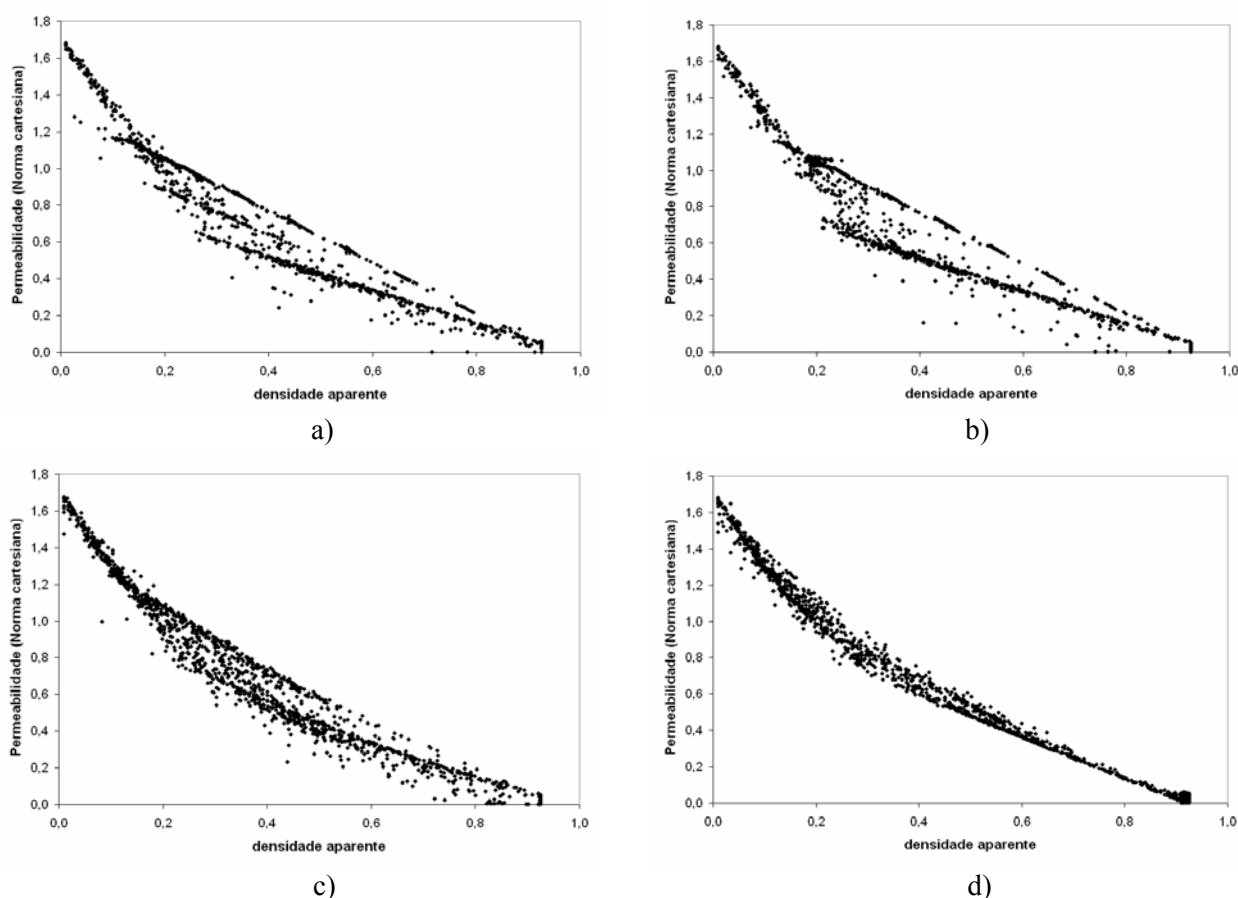


Figura 6.32. Gráfico da norma euclidiana das componentes da diagonal do tensor da permeabilidade em função da densidade aparente: a) Sem constrangimento de permeabilidade; b) Com função de permeabilidade mínima f_1 ; c) Com função f_2 ; d) Com função f_3 .

Outro gráfico útil na análise dos resultados é do tipo apresentado na figura 6.33, conforme já apresentado e explicado na secção anterior (ver figura 6.23).

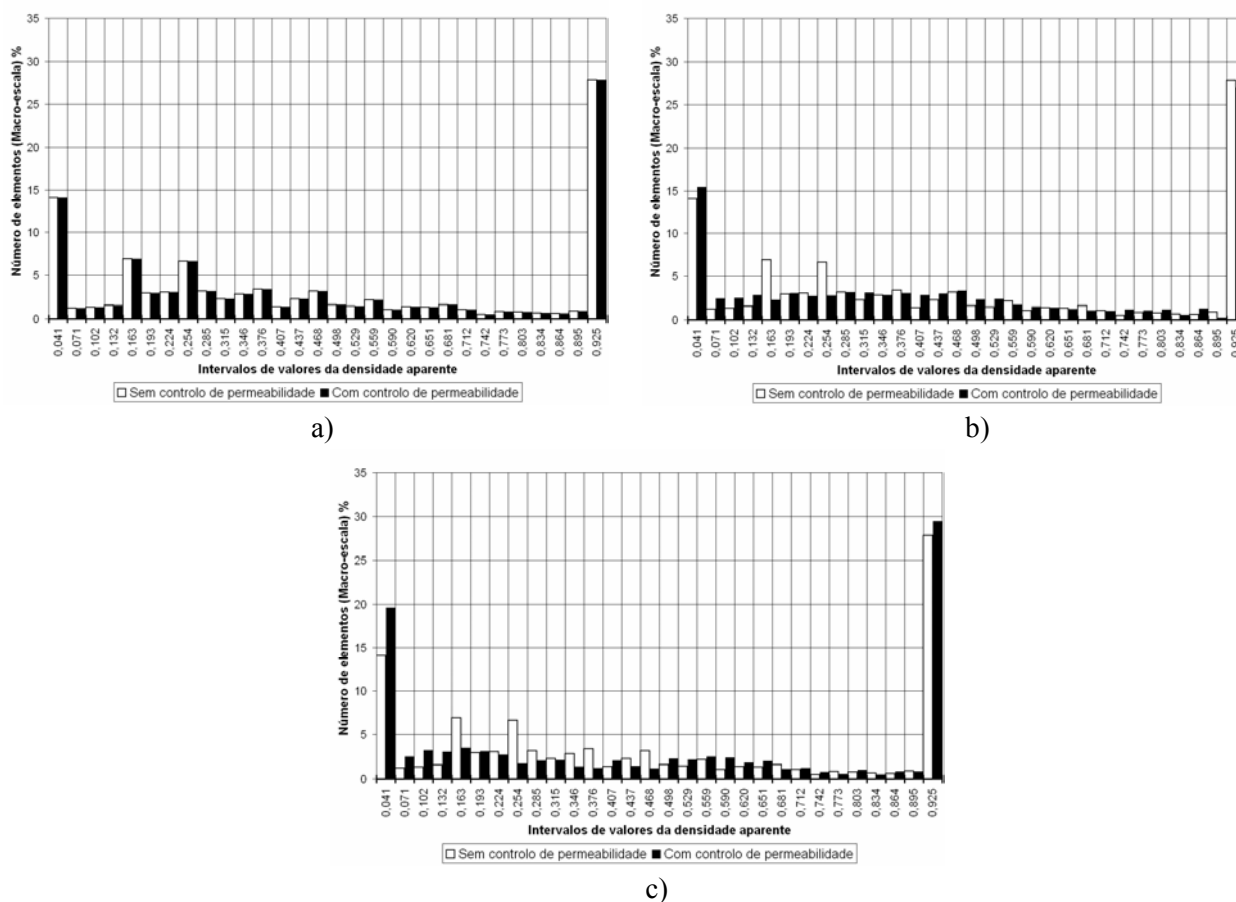


Figura 6.33. Contagem do número de elementos finitos macroscópicos [%] existentes dentro de cada um dos sub-intervalos da densidade aparente: a) Com função de permeabilidade mínima f_1 ; b) Com função f_2 ; c) Com função f_3 .

Nos gráficos da figura 6.33 a distribuição obtida com controlo de permeabilidade é sempre comparada com a situação de não controlo. Efectuando esta comparação, só são encontradas diferenças significativas nos casos das figuras 6.33b e 6.33c. As distribuições destas figuras obtidas com controlo de permeabilidade são comparativamente bem mais regulares tal como já havia sido observado anteriormente quando se introduziu o critério local de densidade de superfície. No entanto, a distribuição verificada na figura 6.33b parece ser biologicamente mais consistente do que a da figura 6.33c, pois exibe um maior número de densidades intermédias na primeira metade do intervalo (atingindo aqui um valor máximo). A distribuição da figura 6.33c é bimodal, sendo o segundo pico pouco realista pois se enquadra num sub-intervalo de densidades onde o osso trabecular já quase não existe na realidade. Por

estas razões apresentadas, a permeabilidade mínima dada pela função f_2 é adoptada nesta dissertação como a situação mais realista e, por isso, será utilizada na apresentação dos restantes resultados da dissertação.

A figura 6.34 apresenta um conjunto de elementos finitos seleccionados da malha macroscópica com o objectivo de mostrar algumas soluções de microestrutura representativas de diferentes regiões anatómicas da parte proximal do fémur. A tabela 6.5 apresenta para os elementos seleccionados na figura 6.34 os valores das componentes do tensor da permeabilidade para os casos de não controlo e controlo (função f_2).

Quando não existe controlo de permeabilidade, as permeabilidades medidas em algumas direcções cartesianas são nulas (caso, por exemplo, dos laminados), valores nulos são destacados a vermelho na tabela. As soluções de microestrutura sem controlo de permeabilidade correspondentes aos elementos seleccionados podem ser visualizadas na tabela 6.6.

Quando a permeabilidade é imposta com um valor mínimo K_{min} função de ρ e obrigando as componentes fora da diagonal a serem iguais a zero, obtém-se uma permeabilidade ortotrópica caracterizada pelos valores da tabela 6.5 para os elementos seleccionados. Neste caso as correspondentes soluções de microestrutura podem ser observadas na tabela 6.7.

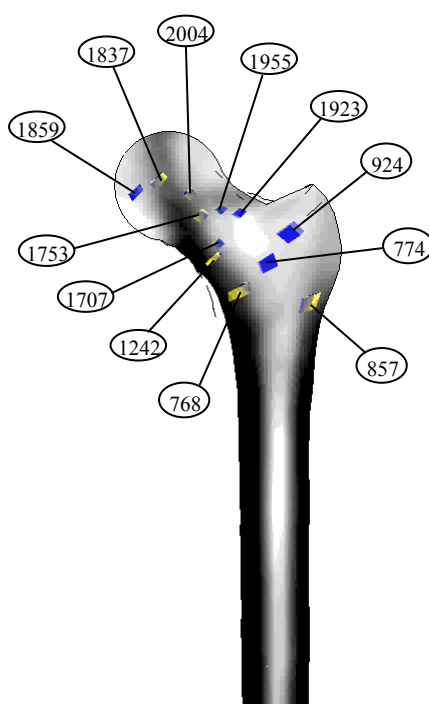


Figura 6.34. Selecção de elementos finitos macroscópicos para análise e visualização dos resultados ao nível da microestrutura.

Tabela 6.5. Caracterização do tensor da permeabilidade nos elementos finitos macroscópicos seleccionados da figura 6.34.

Elem	Sem constrangimento de permeabilidade							Com constrangimento de permeabilidade					
	ρ	K_{11}^H	K_{22}^H	K_{33}^H	K_{12}^H	K_{13}^H	K_{23}^H	ρ	K_{\min}	K_{11}^H	K_{22}^H	K_{33}^H	$K_{ij,i \neq j}^H$
		$\times 100$							$\times 100$				
768	0.478	0.0	43.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.620	4.4	4.4	29.1	4.4	0.0
774	0.244	0.0	70.4	70.4	0.0	0.0	0.0	0.241	30.1	56.4	46.2	48.2	0.0
857	0.482	0.0	44.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.432	14.0	14.0	49.2	14.0	0.0
924	0.216	0.0	72.4	72.4	0.0	0.0	0.0	0.111	45.8	57.0	79.3	79.3	0.0
1242	0.826	9.9	3.9	0.0	0.0	0.0	3.3	0.631	4.0	4.0	23.1	7.8	0.0
1707	0.311	54.8	62.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.348	20.0	52.1	58.6	20.0	0.0
1753	0.458	23.3	46.6	23.3	0.0	23.3	0.0	0.488	10.6	10.6	38.5	10.6	0.0
1837	0.350	0.0	55.5	48.6	0.0	0.0	1.4	0.299	24.4	39.1	57.4	24.4	0.0
1859	0.292	26.4	51.8	49.7	5.0	-13.7	6.1	0.147	41.2	64.4	64.4	69.9	0.0
1923	0.313	47.7	22.8	49.8	1.8	7.2	4.8	0.203	33.4	56.4	44.2	60.5	0.0
1955	0.499	42.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.429	13.9	43.6	13.9	13.9	0.0
2004	0.367	0.0	0.0	54.8	0.0	0.0	0.0	0.293	23.1	23.1	23.1	56.8	0.0

Tabela 6.6. Visualização da microestrutura obtida nos elementos finitos macroscópicos seleccionados na figura 6.34. Sem constrangimento de permeabilidade mínima.

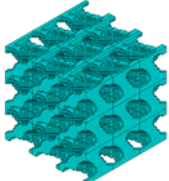
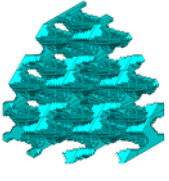
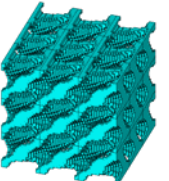
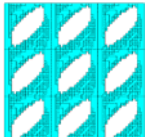

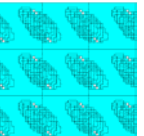
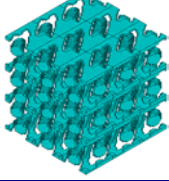
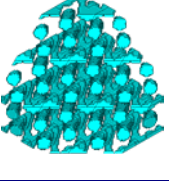
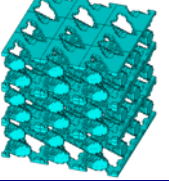
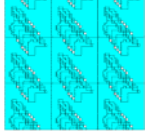
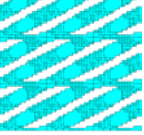
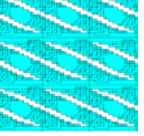
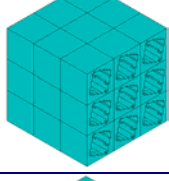
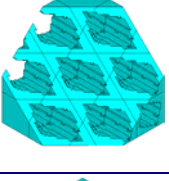
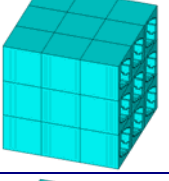
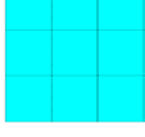
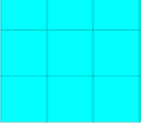
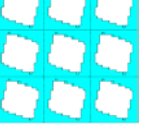
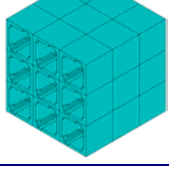
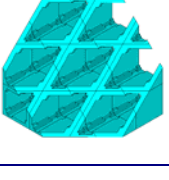
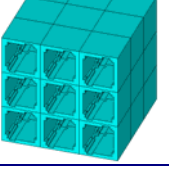
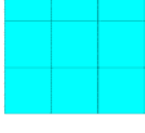
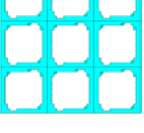
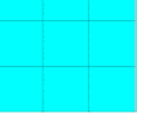
Elem	Perspectivas			Vistas laterais		
	Isométrica	Isométrica (corte 45°)	Oblíqua	Topo (Sup.-Inf.)	Frente (Med.-Lat.)	Direita (Ant.-Post.)
1859						
1923						
1955						
2004						

Tabela 6.6 (continuação) Visualização da microestrutura obtida nos elementos finitos macroscópicos seleccionados na figura 6.34. Sem constrangimento de permeabilidade mínima.

Elem	Perspectivas			Vistas laterais		
	Isométrica	Isométrica (corte 45°)	Obliqua	Topo (Sup.-Inf.)	Frente (Med.-Lat.)	Direita (Ant.-Post.)
768						
774						
857						
924						
1242						
1707						
1753						
1837						

Embora as fracções volúmicas e estados de tensão locais possam diferir no mesmo elemento finito para as situações de controlo ou não controlo da permeabilidade, pode-se concluir que as geometrias permeáveis da tabela 6.7 apresentam-se em geral bem mais convolutas comparativamente às geometrias da tabela 6.6. As soluções particulares de tubos e laminados na tabela 6.6 maximizam localmente a rigidez para determinados estados de deformação aplicados, mas não satisfazem os requisitos de permeabilidade da microestrutura do osso. A maximização da rigidez com critérios locais de permeabilidade mínima, conduzem a soluções locais de compromisso entre estes dois factores co-existent na arquitectura trabecular do osso. No caso de controlo da permeabilidade, as soluções tipo tubo ou laminado continuam a surgir mas permitem agora a passagem de uma quantidade mínima de fluido em todas as direcções espaciais. Soluções mais próximas do tipo laminado são obtidas tipicamente mais na região da metáfise enquanto as soluções mais próximas de células fechadas são obtidas mais na região da cabeça onde o efeito multicarga é maior.

Tabela 6.7. Visualização da microestrutura obtida nos elementos finitos macroscópicos seleccionados na figura 6.34. Com constrangimento de permeabilidade mínima dado por f_2 .

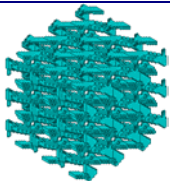
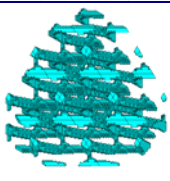
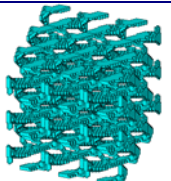
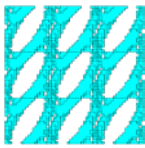
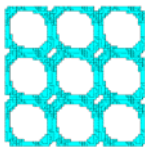
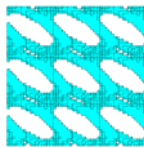
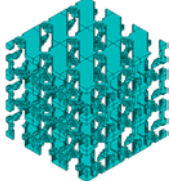
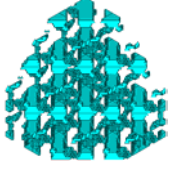
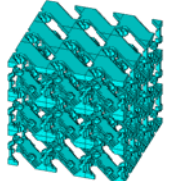
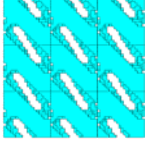
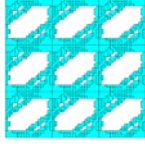
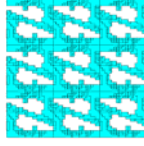
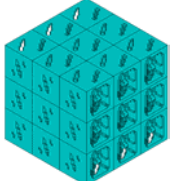
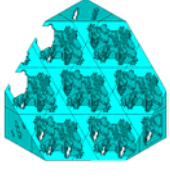
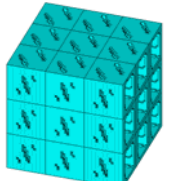
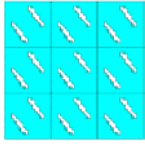
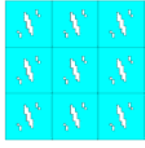

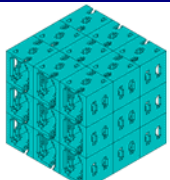
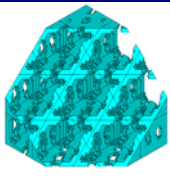
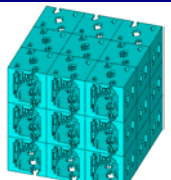
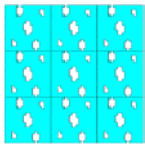
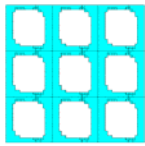

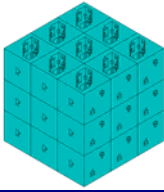
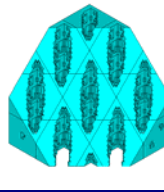
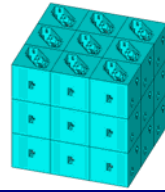
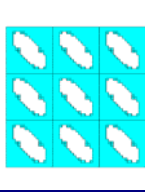
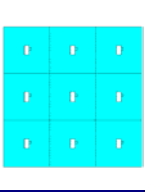
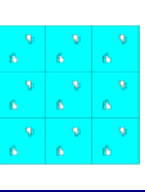
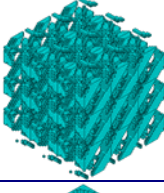
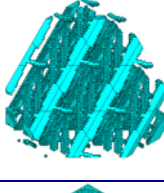
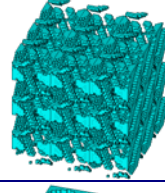
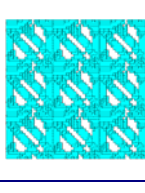
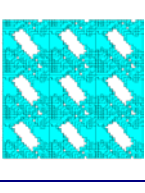
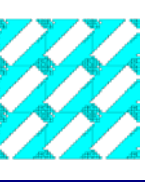
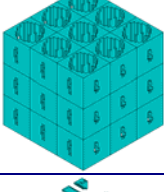
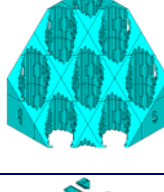

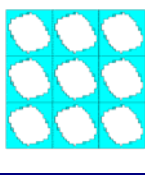
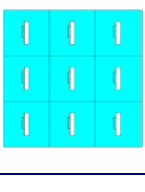
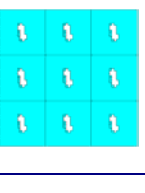
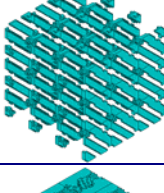
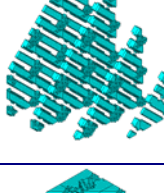
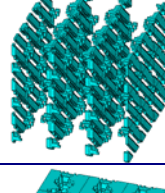
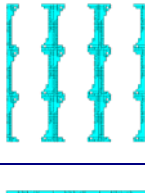
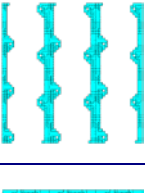
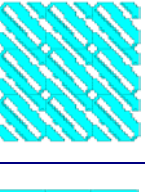
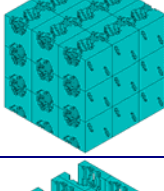
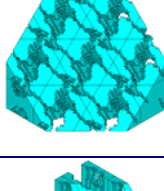
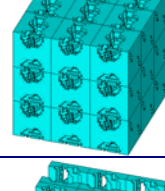
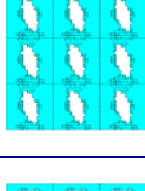
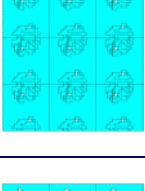
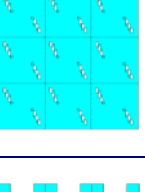
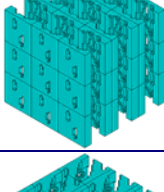
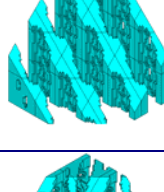
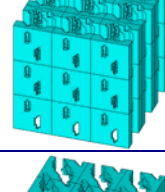
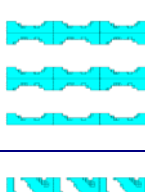
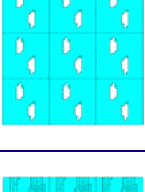
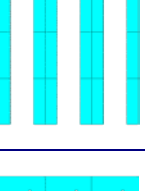
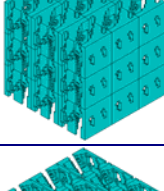
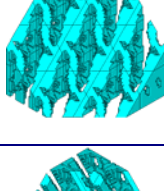
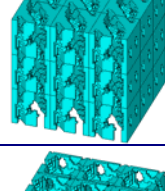

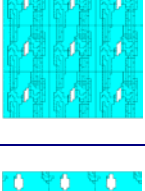
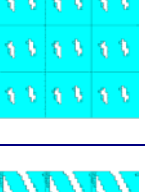
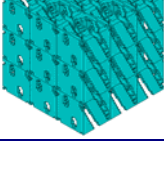

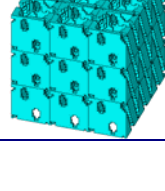
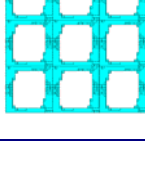
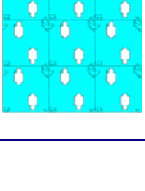

Elem	Perspectivas			Vistas laterais		
	Isométrica	Isométrica (corte 45°)	Obliqua	Topo (Sup.-Inf.)	Frente (Med.-Lat.)	Direita (Ant.-Post.)
1859						
1923						
1955						
2004						

Tabela 6.7 (continuação). Visualização da microestrutura obtida nos elementos finitos macroscópicos seleccionados na figura 6.34. Com constrangimento de permeabilidade mínima dado por f_2 .

Elem	Perspectivas			Vistas laterais		
	Isométrica	Isométrica (corte 45°)	Obliqua	Topo (Sup.-Inf.)	Frente (Med.-Lat.)	Direita (Ant.-Post.)
768						
774						
857						
924						
1242						
1707						
1753						
1837						

A figura 6.35 apresenta os gráficos da anisotropia de algumas das microestruturas na tabela 6.7. Conforme observado, a anisotropia é bem característica do osso trabecular. Existem algumas microestruturas alinhadas de forma preferencial no espaço enquanto outras exibem um comportamento mecânico mais próximo do isotrópico.

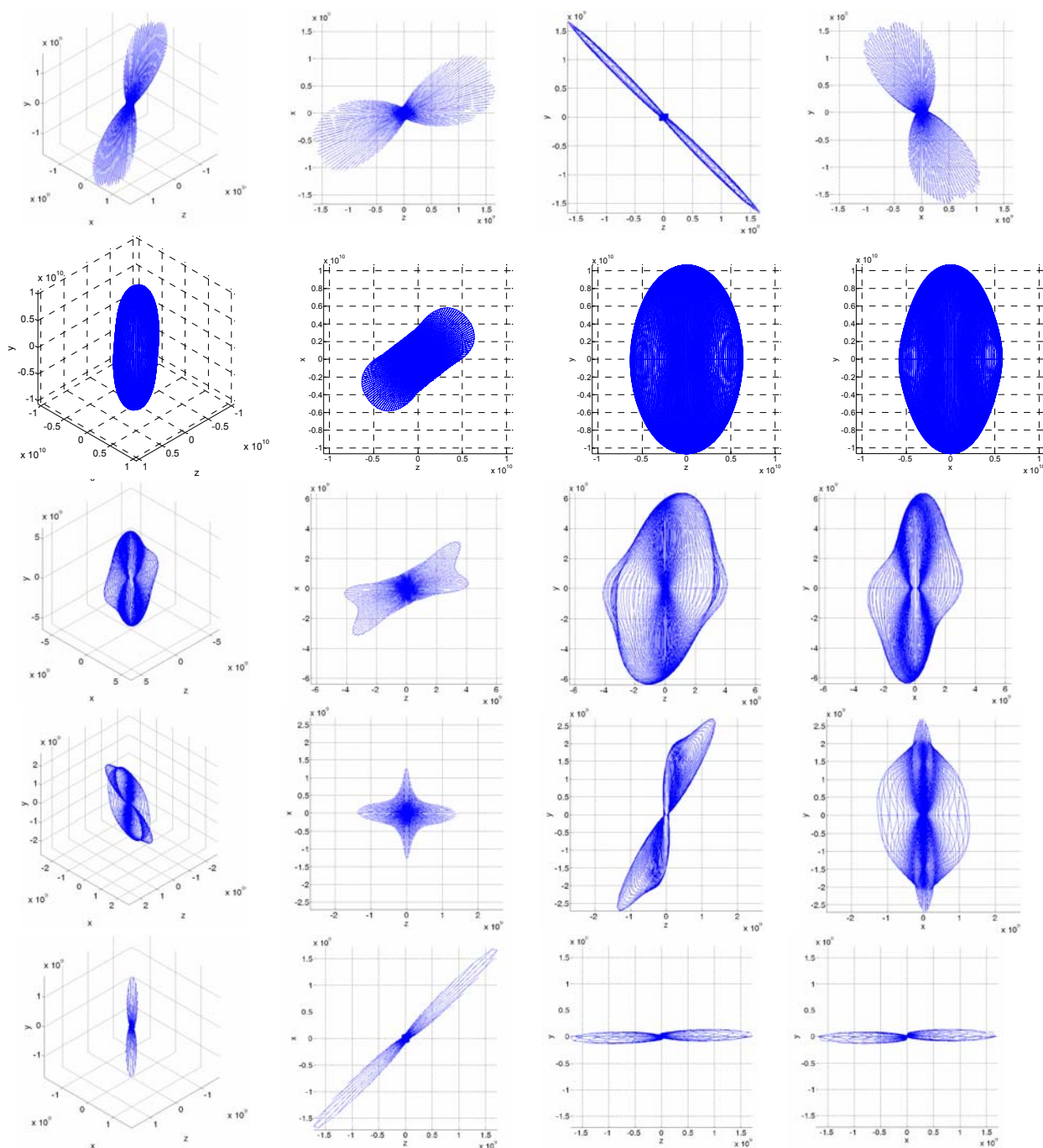


Figura 6.35. Representação gráfica da anisotropia em alguns elementos finitos macroscópicos seleccionados na figura 6.34. Da esquerda para a direita são apresentadas diferentes vistas do mesmo gráfico de anisotropia. De cima para baixo os gráficos correspondem à anisotropia medida nos elementos 774, 768, 1753, 1837 e 1923, respectivamente.

6.4. Influência do factor custo metabólico e validação DXA

A osteoporose (OP) é uma doença óssea metabólica que se caracteriza pela redução da massa óssea acompanhada da deterioração da microarquitectura e das propriedades biomecânicas do osso. Estas alterações levam a um aumento da fragilidade do osso e, conseqüentemente, ao aumento do risco de fractura (Canhão *et al.*, 2005). As fracturas osteoporóticas, e em particular as da extremidade proximal do fémur surgem como a consequência mais nefasta da OP. Relativamente ao diagnóstico clínico de OP, este é baseado na absorciometria radiológica de dupla energia (DXA¹), sendo a OP actualmente diagnosticada com base no valor de *T-score*, calculado a partir da densidade mineral óssea (DMO) obtida por DXA. De acordo com a classificação da Organização Mundial de Saúde, uma DMO igual ou inferior a menos de 2.5 desvios padrão em relação ao pico de massa óssea (*T-score* igual ou inferior a -2,5) define o diagnóstico de OP (Heinz e Folgeman, 1994). A DXA mede a DMO, que tem um coeficiente de correlação de cerca de 0,4 com a resistência do osso (Fung, 1993). Esta correlação parcial reflecte-se numa capacidade limitada de predição do risco de fractura, que não permite explicar todos os episódios de fractura associados à OP. Neste sentido, o conceito de qualidade do osso tem vindo a emergir ao nível da investigação. Este conceito abrange todos os factores que influenciam a resistência do osso à fractura, mas que não são tidos em conta em medidas quantitativas como a DMO, reflectindo particularmente as propriedades estruturais e mecânicas do osso (Hernandez e Keaveny, 2006). O facto dos métodos de diagnóstico actuais não permitirem a avaliação da qualidade do osso *in vivo*, leva à procura de alternativas viáveis para o seu estudo, nas quais se incluem as simulações numéricas de processos biológicos.

Os resultados do exame DXA na figura 6.36a mostram como um osso saudável pode degenerar num quadro clínico de doença (osteoporose). Estas alterações podem ser simuladas numericamente através do parâmetro k em (5.1). Este parâmetro tem o significado de um custo metabólico de formação de osso. Quando k aumenta, a massa óssea total diminui conforme apresentado na figura 6.36b. Na apresentação dos resultados numéricos nesta figura, ao contrário das figuras anteriores, o “branco” identifica osso compacto e o “preto”

¹ Dual-energy X-ray Absorptiometry.

ausência de osso. Esta inversão da escala de cinzentos foi aqui levada em consideração para permitir uma comparação directa com as imagens obtidas pelo exame DXA.

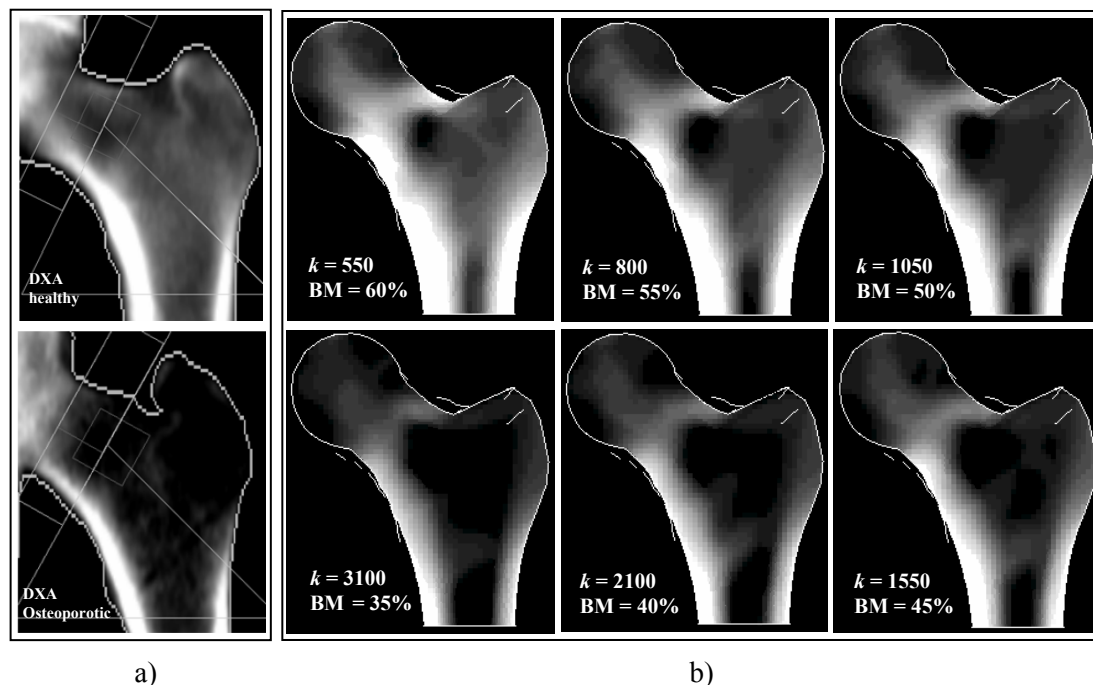


Figura 6.36. Comparação qualitativa entre exames DXA e resultados numéricos obtidos variando k (J/m^3): a) Exame DXA em cima mostra osso saudável (compara-se com $k = 550$) e em baixo mostra osso osteoporótico (compara-se com $k = 3100$); b) Resultados numéricos da densidade aparente para diferentes valores do parâmetro custo metabólico k (massa óssea em % e vistas da secção média coronal), extraída de Coelho *et al.* (2009b).

Santos *et al.* (2008) mostram que uma correlação matemática pode ser estabelecida entre k e os resultados de T -score do exame DXA (para mais detalhes ver Santos *et al.*, 2008). Esta correlação quantitativa é usada para validar quantitativamente os resultados do modelo hierárquico através de uma comparação entre as figuras 6.36a e 6.36b. O exame DXA apresentado na figura 6.36a (topo) foi escolhido para um T -score que está matematicamente correlacionado com $k = 550$ (ver figura 6.36b). Do mesmo modo, a imagem DXA da figura 6.36 (em baixo) está correlacionada com $k = 3100$ (ver figura 6.36b).

A modelação matemática do factor biológico k mostra a sua eficácia visto que os resultados correspondentes dados pelo modelo computacional captam adequadamente a perda de massa óssea associada à transição de um estado normal de saúde para um estado de osteoporose, conforme mostrado pelos resultados dos exames DXA. Na figura 4.36b, a simulação numérica do cenário de perda de massa óssea concorda com a evolução fisiológica de osteoporose. A camada exterior de osso compacto na diáfise não é tão grandemente

afectada pelas variações no valor de k (pequena diminuição de espessura) como é o osso trabecular na região da epífise. De facto, a perda de osso começa no triângulo de Ward e sucessivamente propaga-se à região trocantérica.

A figura 6.37 apresenta quatro microestruturas e a evolução de cada uma com o aumento do valor de k . Estes resultados reproduzem alguns dos acontecimentos fisiológicos numa evolução osteoporótica ao nível trabecular. Inicialmente a perda de osso conduz a uma diminuição das espessuras das trabéculas sem perda significativa de conectividade. Quando a perda de osso se torna severa, o processo de adelgaçamento das trabéculas degenera em perda de conectividade, o que na realidade tem um efeito preponderante na perda da resistência mecânica do osso, aumentando dramaticamente o risco de fractura.

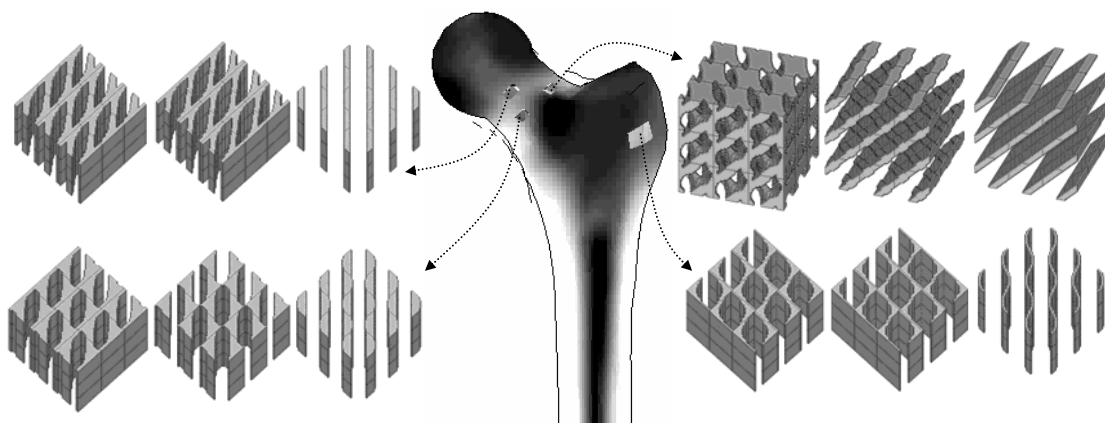


Figura 6.37. Variação da microestrutura com o aumento do custo metabólico k (da esquerda para a direita em cada elemento finito seleccionado).

Saliente-se que as medidas do exame DXA podem verificar efectivamente a massa óssea (quantidade de tecido ósseo) mas pouco ou nada informam sobre o estado real da qualidade do osso (propriedades microestruturais relacionadas com a resistência do osso). Visto que este exame de diagnóstico não diz tudo, alguns indivíduos têm sido vítimas de fracturas apesar do *T-score* medido estar abaixo do limiar de osteoporose estipulado pela OMS. Deste modo, a conjugação adequada de meios de imagem médica de diagnóstico (como o DXA) com simulações computacionais (como o modelo numérico apresentado permite fazer), podem aumentar o conhecimento acerca do processo de remodelação óssea e a resistência à fractura.

Os resultados apresentados nas figuras 6.36 e 6.37 foram obtidos com o modelo hierárquico de remodelação óssea sem outros critérios locais para além da rigidez e da fracção volumica. Os resultados que se apresentam de seguida até ao final desta secção correspondem ao estudo da influência do factor k levando em conta o constrangimento de permeabilidade

mínima dada pela função f_2 conforme definida na secção anterior. A figura 6.38 apresenta a influência do factor k na distribuição de densidade aparente. Basicamente estes resultados são semelhantes aos apresentados na figura 6.36 embora com escala de cinzentos invertida. A figura 6.39 apresenta a selecção de alguns elementos finitos da zona proximal do fémur para visualização da microestrutura.

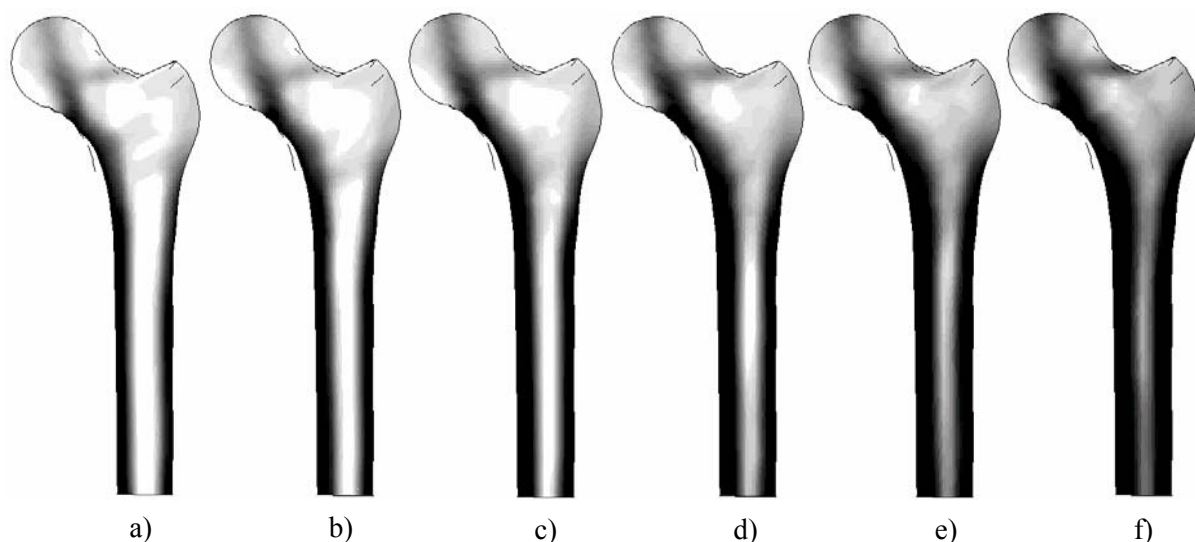


Figura 6.38. Distribuição da densidade aparente para diferentes valores do factor custo metabólico k correspondentes a diferentes fracções volumicas: a) 35%; b) 40%; c) 45%; d) 50%; e) 55%; f) 60%.

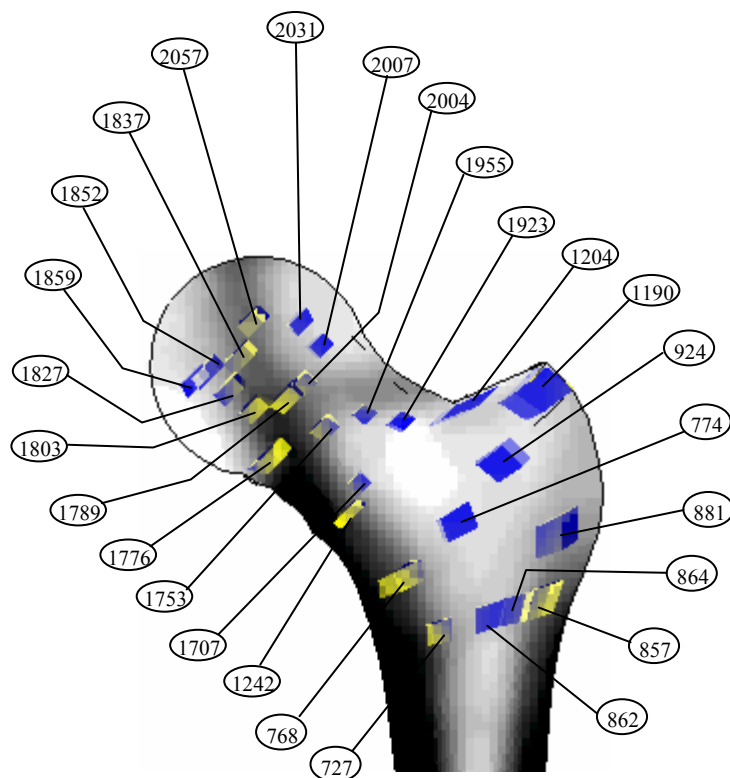


Figura 6.39. Selecção de EF para a análise e visualização dos resultados ao nível da microestrutura.

Tabela 6.8. Resultados de fracção volúmica, densidade de superfície, permeabilidade e rigidez para algumas microestruturas seleccionadas. Para cada microestrutura os resultados são apresentados para diferentes valores do parâmetro custo metabólico k associados a diferentes fracções volúmicas globais:

35%, 40%, 45%, 50%, 55% e 60%.

Elemento	V [%]	ρ	S_v [mm ² /mm ³]	K_{min} [%]	K_{11}^H	K_{22}^H	K_{33}^H	E_{1111}^H	E_{2222}^H	E_{3333}^H
					[%]			[Pa]		
768	35	0.245	3.287	29.7	41.1	52.6	41.9	0.302E+09	0.825E+09	0.648E+09
	40	0.325	3.460	22.0	22.0	50.4	22.0	0.641E+09	0.249E+10	0.137E+10
	45	0.457	3.644	12.2	12.2	40.2	12.2	0.120E+10	0.636E+10	0.398E+10
	50	0.618	2.649	4.4	4.4	29.1	4.4	0.478E+10	0.117E+11	0.639E+10
	55	0.674	2.449	2.6	2.6	24.3	2.6	0.669E+10	0.136E+11	0.688E+10
	60	0.703	2.461	2.0	2.0	22.3	2.0	0.552E+10	0.141E+11	0.867E+10
774	35	0.222	3.393	32.2	59.6	48.4	50.2	0.307E+09	0.481E+09	0.488E+09
	40	0.146	2.325	41.2	66.7	66.1	66.1	0.779E+08	0.351E+09	0.353E+09
	45	0.172	2.807	37.9	62.1	58.3	59.4	0.125E+09	0.374E+09	0.388E+09
	50	0.241	3.427	30.1	56.3	46.2	48.2	0.298E+09	0.681E+09	0.699E+09
	55	0.300	3.643	24.2	51.2	34.4	37.3	0.549E+09	0.925E+09	0.967E+09
	60	0.346	3.466	20.2	45.8	31.9	36.3	0.628E+09	0.129E+10	0.121E+10
857	35	0.123	1.100	44.1	71.5	83.1	71.9	0.763E+02	0.197E+10	0.647E+02
	40	0.037	0.462	56.3	88.5	93.8	90.2	0.317E+02	0.174E+09	0.344E+02
	45	0.158	1.089	39.7	62.1	79.3	69.6	0.856E+02	0.134E+10	0.826E+02
	50	0.427	2.443	14.1	13.8	49.2	13.8	0.259E+10	0.775E+10	0.274E+10
	55	0.536	2.370	7.8	7.3	38.4	7.3	0.474E+10	0.106E+11	0.409E+10
	60	0.658	2.176	3.1	3.1	27.5	3.1	0.729E+10	0.134E+11	0.663E+10
924	35	0.035	0.936	56.3	84.3	87.8	88.0	2.758E+06	9.432E+07	9.469E+07
	40	0.080	1.698	49.9	68.7	82.4	82.9	3.158E+03	2.167E+08	2.340E+08
	45	0.059	1.387	50.8	71.9	84.8	84.9	3.983E+03	9.932E+07	1.030E+08
	50	0.111	1.906	45.8	57.0	79.3	79.3	9.442E+03	3.356E+08	3.301E+08
	55	0.250	2.401	29.2	29.2	65.3	65.3	1.722E+03	2.439E+09	2.409E+09
	60	0.346	2.431	20.2	20.2	55.3	55.7	2.021E+03	4.360E+09	4.603E+09
1242	35	0.190	1.561	35.8	71.6	75.2	35.8	9.257E+08	2.876E+09	3.703E+03
	40	0.177	1.274	39.2	63.1	78.6	66.6	8.627E+01	2.781E+09	9.155E+01
	45	0.425	2.881	14.2	14.2	46.9	44.4	3.683E+07	6.893E+09	3.507E+09
	50	0.631	3.142	4.0	4.0	23.1	7.8	2.611E+09	1.030E+10	6.986E+09
	55	0.925	1.351	0.0	0.0	2.2	0.5	1.616E+10	2.137E+10	2.031E+10
	60	0.925	1.301	0.0	0.0	0.0	0.0	1.943E+10	2.173E+10	2.047E+10
1707	35	0.266	1.854	27.6	63.9	66.6	27.6	1.308E+09	4.199E+09	1.363E+03
	40	0.248	1.797	29.4	65.8	68.9	29.4	1.691E+09	4.052E+09	6.380E+02
	45	0.289	1.947	25.3	59.7	64.7	25.3	2.020E+09	4.890E+09	2.531E+03
	50	0.348	2.075	20.0	52.1	58.6	20.0	2.798E+09	6.142E+09	1.230E+03
	55	0.417	2.490	14.8	16.2	50.3	14.8	3.519E+09	7.381E+09	6.452E+08
	60	0.479	2.575	10.8	10.9	44.7	10.9	3.944E+09	8.913E+09	3.191E+09
1753	35	0.363	3.100	18.9	47.8	19.1	26.7	1.246E+09	2.262E+09	3.156E+09
	40	0.553	3.206	7.2	7.3	9.6	29.0	2.246E+09	6.418E+09	7.514E+09
	45	0.414	3.044	15.0	15.0	35.1	42.7	6.931E+08	4.768E+09	4.979E+09
	50	0.488	3.429	10.6	10.9	38.5	10.9	1.178E+09	6.608E+09	5.027E+09
	55	0.617	3.285	4.6	4.6	27.3	4.7	1.866E+09	1.036E+10	7.253E+09
	60	0.640	3.250	3.7	3.8	25.2	3.8	2.014E+09	1.120E+10	7.658E+09

Tabela 6.8 (continuação). Resultados de fracção volúmica, densidade de superfície, permeabilidade e rigidez para algumas microestruturas seleccionadas. Para cada microestrutura os resultados são apresentados para diferentes valores do parâmetro custo metabólico k associados a diferentes fracções volúmicas globais: 35%, 40%, 45%, 50%, 55% e 60%.

Elemento	V [%]	ρ	S_v [mm ² /mm ³]	K_{min} [%]	K_{11}^H	K_{22}^H	K_{33}^H	E_{1111}^H	E_{2222}^H	E_{3333}^H
					[%]			[Pa]		
1837	35	0.263	2.944	27.8	46.6	61.1	28.2	7.727E+08	2.719E+09	1.690E+08
	40	0.331	3.121	21.4	37.0	54.2	21.4	1.709E+09	3.887E+09	2.624E+08
	45	0.286	3.080	25.4	41.5	58.6	25.7	1.096E+09	3.120E+09	1.697E+08
	50	0.299	3.098	24.4	39.1	57.4	24.2	1.404E+09	3.354E+09	1.866E+08
	55	0.395	3.048	16.3	16.3	49.7	16.3	2.603E+09	5.547E+09	1.202E+09
	60	0.412	3.096	15.0	15.0	48.2	15.0	2.335E+09	5.926E+09	1.818E+09
1859	35	0.139	2.121	42.0	64.6	65.8	70.7	1.454E+08	2.307E+08	4.980E+08
	40	0.166	2.233	38.6	40.8	64.4	69.0	1.436E+08	4.831E+08	6.721E+08
	45	0.203	2.468	34.7	34.9	58.5	63.2	3.061E+08	6.001E+08	9.770E+08
	50	0.147	2.160	41.2	64.4	64.4	69.9	1.621E+08	1.818E+08	5.705E+08
	55	0.200	2.439	34.5	43.1	60.7	62.8	2.824E+08	6.311E+08	8.165E+08
	60	0.243	2.582	30.2	33.5	57.0	61.0	3.490E+08	1.569E+09	9.594E+08
1923	35	0.160	2.839	40.7	63.0	60.5	65.9	1.478E+08	2.485E+07	6.946E+08
	40	0.113	2.394	44.3	68.0	63.8	71.4	1.990E+08	2.282E+07	3.691E+08
	45	0.177	1.982	37.5	72.4	37.3	74.3	2.772E+08	2.258E+06	1.723E+09
	50	0.203	2.759	33.4	56.4	44.2	60.5	6.654E+08	6.111E+07	7.548E+08
	55	0.214	2.878	33.0	56.8	41.7	61.9	6.255E+08	5.418E+07	8.737E+08
	60	0.299	3.751	24.3	42.3	30.8	48.7	6.765E+08	6.926E+07	1.770E+09
1955	35	0.339	2.807	20.8	40.4	42.5	41.2	5.204E+08	3.246E+09	1.672E+09
	40	0.363	2.897	18.6	42.7	19.5	38.0	1.273E+09	2.581E+09	2.314E+09
	45	0.407	3.167	15.0	44.6	15.2	15.2	2.820E+09	3.581E+09	2.688E+09
	50	0.429	3.128	13.9	43.6	13.8	13.8	3.736E+09	4.385E+09	2.714E+09
	55	0.405	2.954	15.3	45.4	27.5	15.5	3.269E+09	4.811E+09	1.572E+09
	60	0.342	3.012	19.6	48.9	35.9	20.2	1.784E+09	3.422E+09	1.447E+09
2004	35	0.272	2.535	27.0	60.6	38.6	27.0	1.853E+09	3.161E+09	9.108E+08
	40	0.302	2.726	24.0	57.6	24.0	24.0	2.454E+09	3.241E+09	1.657E+09
	45	0.350	2.832	19.7	20.1	20.1	53.5	1.487E+09	3.820E+09	4.299E+09
	50	0.293	2.836	23.1	24.3	24.3	56.8	1.277E+09	2.670E+09	3.382E+09
	55	0.288	2.685	25.3	25.4	52.0	58.6	9.043E+07	3.624E+09	3.402E+09
	60	0.438	3.124	13.3	13.3	31.1	13.3	2.302E+09	6.023E+09	4.743E+09

A tabela A1 (ver anexo A) apresenta as microestruturas obtidas para os elementos finitos seleccionados considerando diferentes valores de k no modelo de remodelação óssea, ou seja, diferentes valores globais de fracção volúmica, 35%, 40%, 45%, 50%, 55% e 60%. A tabela 6.8 apresenta quantitativamente para alguns dos elementos seleccionados a variação da fracção volúmica local, densidade de superfície, permeabilidade e rigidez quando varia o factor k .

À semelhança da interpretação feita para a figura 6.37, os resultados da tabela A1 permitem observar a influência da perda sucessiva de massa óssea (osso saudável →

osteopenia → osteoperose) na geometria trabecular do osso. Neste sentido de evolução do osso, verifica-se sucessivamente perda de conectividade, adelgaçamento, diminuição de densidade (aumenta a permeabilidade), etc. Neste caso, a influência do constrangimento de permeabilidade é bem observável ao impedir o aparecimento de paredes fechadas quer em situações de densidade elevada ou reduzida, o que não acontecia no caso da figura 6.37.

Os resultados na tabela A1 e os gráficos de anisotropia nas figuras A1 a A5 para algumas das microestruturas seleccionadas permitem verificar uma diminuição da rigidez estrutural do osso quando o factor k aumenta. Esta degradação das propriedades mecânicas pode não ocorrer de forma proporcional em todas as direcções no espaço, casos das figuras A1, A3. Verifica-se também no caso A1 um certo redireccionamento na disposição do material (trabéculas) no espaço para suprir maior resistência nas direcções de maior solicitação. Nos casos das figuras A2, A4 e A5 a rigidez medida diminui aproximadamente de forma proporcional. Nestes casos as direcções preferenciais de carga não são tão alteradas com a evolução do factor k . As regiões do osso que se encontram mais sob o efeito multicarga tendem a variar a rigidez de forma mais proporcional quando varia o factor k (caso, por exemplo, da região da cabeça, elemento 1837).

Os resultados da tabela 6.8 evidenciam de uma forma geral que quando aumenta k (diminui a fracção volúmica global), a densidade local diminui, a densidade de superfície tipicamente atinge um máximo para um valor intermédio da densidade local, a permeabilidade aumenta e a rigidez diminui.

A figura A6 mostra as distribuições dos valores das componentes do tensor da elasticidade segundo as direcções cartesianas do referencial global (E^H_{1111} , E^H_{2222} e E^H_{3333}) para diferentes valores de k . Aqui também se torna perceptível que existe uma diminuição da rigidez com o aumento de k e que essa diminuição pode ser proporcional em alguns casos. Por exemplo, comparando as distribuições das três componentes, observa-se que é a componente E^H_{2222} (azul) que mantém mais o mesmo nível de intensidade com a variação do k , enquanto que as componentes transversais E^H_{1111} e E^H_{3333} mais rapidamente diminuem de intensidade quando k aumenta. Este aspecto sugere, mais uma vez, que à medida que o osso vai ficando osteoporótico, são as direcções mais normais de aplicação da carga (neste caso a direcção vertical, componente E^H_{2222} de compressão) que tendem a manter uma maior integridade estrutural em detrimento das outras. Por este motivo, são as cargas transversais as mais responsáveis pela ocorrência de fracturas e que estão amiúde associadas a actividades menos

comuns da actividade diária como, por exemplo, colisão do membro inferior com um degrau ao subir escadas ou queda accidental ao caminhar na rua, etc.

Os gráficos das figuras A7 a A10 fazem o mesmo tipo de análise já apresentada nas secções anteriores. A distribuição de densidade de área de superfície obtida para os diferentes valores de k na figura A7 pode ser aproximada por uma função polinomial. Neste caso os coeficientes s_i dos polinómios interpoladores são apresentados na tabela 6.9 e os respectivos gráficos das funções polinomiais são apresentados na figura 6.40.

Tabela 6.9. Coeficientes dos polinómios de interpolação das densidades de área de superfície de osso representados graficamente na figura A7.

Fracção volúmica global [%]	s_1	s_2	s_3	s_4	s_5	s_6
35	-0.014	21.733	-75.030	148.040	-147.28	52.684
40	-0.012	21.521	-70.853	128.180	-115.83	36.902
45	0.000	20.813	-63.955	107.800	-92.443	27.689
50	-0.020	22.571	-75.815	136.030	-120.31	37.421
55	-0.030	24.206	-84.081	151.280	-133.200	41.801
60	-0.030	23.255	-69.754	101.360	-68.556	13.435

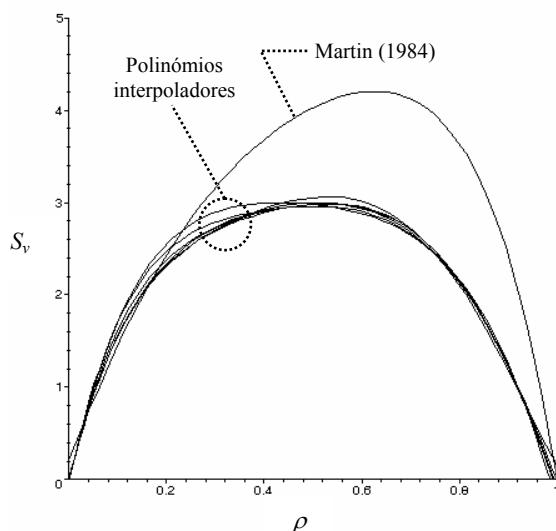


Figura 6.40. Funções polinomiais interpoladoras das distribuições de densidade de área de superfície trabecular mostradas na figura A7 para diferentes valores da fracção volúmica global (diferentes k 's): 35%, 40%, 45%, 50%, 55% e 60%.

Na figura 6.40 as funções polinomiais podem ser comparadas entre si e também com a curva de Martin (1984). É digno de nota a quase sobreposição das funções polinomiais indicando pouca sensibilidade da distribuição “ajustada” da densidade de superfície à variação

do factor k . A função polinomial representada na figura 6.40 para um k correspondente a 50% já havia sido representada anteriormente na figura 6.29b.

A função da permeabilidade mínima imposta (função f_2 da secção anterior) é reproduzida na representação gráfica da permeabilidade na figura A8. A figura A9 é a representação da norma da permeabilidade utilizada. As distribuições da figura A10 permitem enquadrar os resultados obtidos com diferentes valores de k no espaço das soluções biologicamente admissíveis para um osso saudável. É pouco provável que situações extremas consideradas para k (fracções volúmicas globais de 35% e 60%, respectivamente) aproximem a distribuição de densidade aparente num osso são. A distribuição que parece ser efectivamente mais realista corresponde ao k para 50% de fracção volúmica global. Esta constatação acaba por confirmar e validar a escolha do valor de k correspondente 50% para a apresentação dos principais resultados desta dissertação relativos ao problema de remodelação óssea.

Capítulo 7

Conclusões e

Desenvolvimentos Futuros

A presente dissertação constitui uma contribuição para o tema da análise e síntese de estruturas e materiais com aplicações a estruturas mecânicas e biológicas. O modelo hierárquico apresentado envolve a definição de duas escalas de comprimento, macro e microscópicas, associadas aos domínios de projecto da estrutura e do material, respectivamente. A formulação *standard* do problema de optimização simultânea da estrutura e do material consiste na maximização da rigidez global (minimização da *compliance*) levando em conta um constrangimento global de volume de material disponível. Os resultados obtidos com o modelo hierárquico mostram uma melhoria da qualidade das soluções finais obtidas, ou seja, correspondem a valores inferiores da *compliance* global quando comparados com a optimização topológica de estruturas baseada no método clássico de interpolação entre rigidez e propriedades do material dado por uma lei de potência (SIMP). Os resultados que poderiam ser obtidos utilizando materiais tipo *Rank-N* muito provavelmente seriam ainda melhores do ponto de vista da rigidez enquanto critério de projecto. No entanto, a vantagem da formulação apresentada reside na possibilidade de projectar e fabricar a microestrutura do material de que é feita a estrutura. Neste modelo admite-se que o material da estrutura é um material celular de microestrutura periódica, pelo menos, localmente periódica.

A optimização concorrente da estrutura e material caracteriza-se como um processo iterativo bastante exigente em termos dos recursos computacionais e tempos de cálculo

envolvidos. Por cada iteração do problema global de optimização associado ao domínio de projecto da estrutura existe uma série de problemas locais associados ao projecto do material. Executar o algoritmo de optimização utilizando apenas um único processador (execução em série) limita muito o interesse prático desta técnica de projecto concorrente pois facilmente problemas reais de engenharia levariam a tempos de cálculo proibitivos. No entanto, visto que os problemas locais de projecto do material podem ser resolvidos de forma independente entre cada duas iterações consecutivas do projecto da estrutura, técnicas de processamento paralelo podem ser utilizadas de forma muito eficiente para reduzir o tempo de cálculo. Os exemplos de estruturas utilizados para obter as medidas de desempenho (*speed-up* e eficiência) da versão do algoritmo em paralelo mostram uma muito boa escalabilidade do problema hierárquico. Acrescentando que a tendência actual é fabricar *hardware* com cada vez maiores capacidades de multi-processamento, pode prever-se que a solução de problemas de computação massiva como aquele objecto desta dissertação podem ficar ao alcance do interesse prático de muitas aplicações em engenharia num futuro próximo.

A paralelização do algoritmo actual pode ainda ser objecto de melhorias futuras. Nomeadamente, o processo de cálculo das propriedades elásticas equivalentes do material celular através de homogeneização que é responsável por uma grande parte do tempo de cálculo, poderá ser susceptível de ser repartido por vários processadores. Além disso, a divisão da carga de cálculo por processador é feita actualmente por divisão do número total de problemas locais pelo número de processadores disponíveis. Um determinado número de problemas locais fica irremediavelmente alocado a um dado processador do princípio ao fim do cálculo. Não existe equilíbrio de carga (*load balancing*) entre processadores ao longo das iterações do problema. A carga nos diferentes processadores ainda pode variar bastante atendendo a que a homogeneização, necessária em cada problema local, implica a solução de um sistema de equações por um método iterativo (PCG) que para convergir necessita de um número diferente de iterações de problema local para problema local. Isto pode significar na prática que, entre cada duas iterações do problema global, um processador pode ser muito rápido no cálculo dos problemas locais que lhe estão associados e depois ficar desocupado durante um período à espera do processador mais lento.

Outro desenvolvimento futuro do modelo hierárquico apresentado diz respeito ao modelo de material. Neste caso, o modelo assume uma classe de materiais celulares periódicos cujas propriedades são calculadas pelo método da homogeneização assintótica. Por um lado,

assume-se que a dimensão característica da célula de base é muito menor do que a dimensão característica do domínio macroscópico. A teoria da homogeneização considerada no âmbito desta tese calcula as propriedades equivalentes do material celular na situação limite em que o quociente entre a dimensão da célula de base e a dimensão da estrutura é zero. Na realidade, isto pode colocar uma limitação na prática de engenharia onde não só se consideram dimensões finitas mas também dimensões mínimas de fabrico. Por outro lado, devido às condições de periodicidade aplicadas ao domínio local de projecto da microestrutura do material e à discretização do domínio global de projecto em elementos finitos, sucede que o material celular projectado é considerado apenas localmente periódico. A célula de base, que repetida gera o material celular da estrutura, pode diferir em termos da sua topologia de uma região para outra da estrutura, porém, assumem-se transições suaves de acordo com as hipóteses da teoria de homogeneização assintótica utilizada. Na prática este aspecto tem como desvantagem não garantir perfeita compatibilidade geométrica entre os diversos materiais celulares através das interfaces dos EF globais. Dentro de cada um destes EF é definido ou otimizado um material celular. No entanto, se o objectivo do projecto do material é apenas a identificação ou caracterização de geometrias associadas a regiões localizadas da estrutura, o modelo actual pode ser suficientemente útil. Além disso, o problema hierárquico pode ser reformulado de modo a que a optimização do material não tenha que resultar sempre em soluções locais diferentes em cada elemento finito macroscópico. De facto, podem ser definidas certas regiões de interesse da estrutura (abrangendo vários EF globais) onde, em cada uma delas, o material celular otimizado apresenta uma topologia uniforme.

A introdução de uma segunda escala no modelo de optimização associada ao projecto do material traz a vantagem acrescida de permitir a introdução de constrangimentos de fabrico do material ou outros relacionados com uma aplicação específica. Para tal, surge a necessidade de algoritmos de solução do problema hierárquico que sejam capazes de lidar com múltiplos constrangimentos locais de projecto das microestruturas. A presente dissertação debruçou-se em particular sobre o desenvolvimento de estratégias algorítmicas eficientes em lidar com problemas de múltiplos constrangimentos. Um estudo comparativo do desempenho de cada uma das estratégias estudadas foi apresentado através de um exemplo estrutural. Os resultados obtidos permitem destacar a estratégia MMA/CONLIN como particularmente promissora em aplicações de optimização hierárquica de estruturas com critério de máxima rigidez para o

carregamento exterior aplicado e sujeitas a múltiplos constrangimentos locais de projecto do material.

Para além das aplicações estruturais, esta dissertação aplica a análise e síntese de estruturas e materiais à simulação computacional da remodelação óssea. O osso é um material hierárquico visto que, dependendo da escala de observação, nele são facilmente reconhecidas diferentes formas de organização estrutural do material. As duas escalas consideradas mais grosseiras correspondem ao osso inteiro (escala macroscópica) e ao osso trabecular diferenciado do osso compacto (escala microscópica). Muitos modelos de remodelação óssea apenas consideram a variação da densidade aparente (medida à escala macroscópica) para prever a adaptação do osso a estímulos mecânicos. Outros modelos têm incluída uma segunda escala que permite estudar a influência do arranjo do material à escala das trabéculas no processo de remodelação óssea. Entre estes modelos estão aqueles que aproximam o osso trabecular como um material celular periódico cujas propriedades equivalentes à escala macroscópica são determinadas por uma técnica de homogeneização. Este é o caso do modelo apresentado nesta dissertação onde é obtida uma solução para a microestrutura representativa de cada zona anatómica do osso resolvendo um problema local de distribuição de material com variáveis de densidade microscópicas. Este tipo de aproximação ao osso trabecular, com introdução da microescala no modelo de remodelação, permite considerar a influência de diversos parâmetros na simulação da remodelação óssea, como por exemplo: anisotropia, densidade de superfície trabecular, permeabilidade, etc. A anisotropia está associada à distribuição eficiente do material para melhorar a relação rigidez estrutural/massa. A importância deste factor é evidente na arquitectura trabecular quando se observa o alinhamento das trabéculas em direcções preferenciais bem definidas do espaço (teoricamente segundo as trajectórias das direcções principais das tensões mecânicas de acordo com a lei de Wolff). Contudo, investigação recente tem mostrado que o osso não pode ser apenas o óptimo da rigidez estrutural porque isso conduziria a soluções biologicamente inexistentes de microestruturas com paredes fechadas (porosas mas não permeáveis). Além disso a remodelação óssea é um processo que ocorre nas superfícies das trabéculas (absorção/aposição). Ainda o transporte de nutrientes, a vascularização e a migração celular são garantidos através da permeabilidade intertrabecular. O modelo hierárquico apresentado aqui simula a adaptação óssea levando em conta as influências da rigidez, anisotropia, densidade de superfície e permeabilidade.

O modelo hierárquico com maximização da rigidez global da estrutura do osso sujeita a constrangimentos locais biológicos é capaz de prever uma distribuição da densidade aparente do osso semelhante à do osso real e as estruturas obtidas à escala microscópica aproximam-se às do osso compacto e do osso trabecular quanto às propriedades anisotrópicas, morfométricas e de permeabilidade. A influência dos constrangimentos locais aplicados é mínima na distribuição da densidade aparente. Pelo contrário, as cargas exteriores aplicadas têm uma enorme influência nesta distribuição. Por este motivo foi objecto de investigação cuidada no âmbito desta dissertação um modelo de cargas fisiológicas, ou seja, os módulos e direcções das cargas aplicadas foram baseados em medições experimentais em laboratório com pessoas usando próteses instrumentadas. O estudo da influência da maioria dos músculos com inserção no fémur foi considerada de forma limitada nesta dissertação, por isso mesmo este pode ser um campo de investigação futura a merecer mais atenção. A conclusão que se pode tirar com base nos resultados obtidos é de que os factores biológicos desempenham um papel importante na microestrutura local do tecido ósseo, enquanto o ambiente mecânico envolvente é preponderante na distribuição global de densidade aparente óssea. Embora a aplicação escolhida na área da biomecânica para esta dissertação tenha sido o osso fémur, é claro que a mesma metodologia apresentada pode ser aplicada a outras regiões ou articulações do corpo humano: vértebra, joelho, ombro, etc.

O modelo hierárquico fornece informação útil em caso de osteoporose, tanto a nível macro como a nível micro. Isto é possível através da variação de um parâmetro relacionado com o custo metabólico de formação do tecido ósseo. Uma correlação entre este parâmetro e os resultados do *T-score* (DXA) pode ser obtida, permitindo a validação qualitativa do modelo. Técnicas como o DXA têm limitações na avaliação da qualidade do osso *in vivo*, pelo que os resultados de um modelo numérico de remodelação óssea podem desempenhar um papel importante na previsão do risco de fractura. Este modelo constitui uma nova abordagem na determinação por métodos computacionais do processo de adaptação do tecido ósseo, obtendo a distribuição da densidade aparente e o comportamento mecânico da estrutura trabecular. Pode por isso constituir uma ferramenta valiosa para o diagnóstico médico, nomeadamente em situações de osteoporose. Pode ainda ser útil na previsão da adaptação óssea a ambientes mecânicos modificados como os que resultam da inserção de próteses. Pode também ser útil em engenharia de tecidos como modelo de apoio ao projecto de *scaffolds* para regeneração do tecido ósseo com aplicações em reconstruções crânio/maxilo-faciais, ortopédicas em ossos longos e fusão intervertebral.

Bibliografia

- A**brahams, P. (2003), Atlas do Corpo Humano (tradução do original: The Atlas of the Human Body). Editorial Estampa, Lda., Lisboa.
- Adams, M.F., Bayraktar, H.H., Keaveny, T.M. e Papadopoulos, P. (2003), Applications of algebraic multigrid to large-scale finite element analysis of whole bone micro-mechanics on the IBM SP, Proceedings of Int Conference for High Performance Computing and Communications, Phoenix, November, 15-21.
- Adams, M.F., Bayraktar, H.H., Keaveny, T.M. e Papadopoulos, P. (2004), “Ultrascale implicit finite element analyses in solid mechanics with over a half a billion degrees of freedom”, Proceedings of High Performance Computing, networking and storage conference”, Pittsburg PA, November, 6-12.
- Allaire, G., Jouve, F. e Toader, A.M. (2002), A level set method for shape optimization. *Comptes Rendus de l’Acad. des Sci* 334 :1125-1130.
- Allaire, G., Jouve, F. e Toader, A.M. (2004), Structural optimisation using sensitivity analysis and a level-set method. *J. Comp Phys*, 104 :363-393.
- Ambrose, C.G. e Clanton, T.O. (2004), Bioabsorbable Implants : Review of clinical experience in orthopaedic surgery. *Annals of Biomedical Engineering*, 32, 1, p. 171.
- Arbenz, P., Van Lenthe, G.H., Mennel, U., Muller, R. e Sala, M. (2008), A scalable multi-level preconditioner for matrix-free μ -finite element analysis of human bone structures. *Int J Num Meth Engrg*, 73:927-947.
- Arramon, Y.P. e Cowin, S.C. (1997), Hydraulic stiffening of cancellous bone. *Forma*, 12: 209-221.
- Auriault, J.L. (1991), Heterogeneous medium. Is an equivalent macroscopic description possible? *Int J Engrg Sci*. Vol 29, No 7, pp.785-795.
- Auriault, J.L. e Lewandowska, J. (1993), Homogenization analysis of diffusion and adsorption macrotransport in porous media: macrotransport in the absence of advection. *Géotechnique* 43, 3, 457-469.
- Auriault, J.L. e Lewandowska, J. (1997), Effective diffusion coefficient: from homogenisation to experiment. *Transport in Porous Media*, 27, 205-223.
- B**abuska, I. (1976), Homogenization and its applications. In *Numerical Solutions of Partial Differential Equations III*, ed. B. Hubbard, Academic Press, pp. 89-116.
- Banichuk, N.V. (1983), *Problems and Methods of Optimal Structural Design*, Planum Press.

- Barbarosie, C. e Toader, A. (2009a), Shape and topology optimization for periodic problems Part I: The shape and the topological derivative. *Struct Multisc Optm*, DOI 10.1007/s00158-009-0378-0.
- Barbarosie, C. e Toader, A. (2009b), Shape and topology optimization for periodic problems Part II: optimization algorithm and numerical examples. *Struct Multisc Optm*, DOI 10.1007/s00158-009-0377-1.
- Barou, O., Mekraldi, S., Vico, L., Boivin, G., Alexandre C. e Lafage-Proust, M.H. (2002), Relationships Between Trabecular Bone Remodeling and Bone Vascularization: A Quantitative Study, *Bone*, Vol 30, No. 4, pp. 604-612.
- Bauer, T.W. e Schils, J. (1999), The pathology of total joint arthroplasty II. Mechanisms of implant failure. *Skeletal Radiology*, 28, p. 483.
- Baumgartner, A., Harzheim, L. e Mattheck, C. (1992), SKO (soft kill option): the biological way to find an optimum structure topology, *Int. J. Fatigue* 14 (6), 387-393.
- Bazaraa, M.S., Sherali, H.D. e Shetty, C.M. (1993), *Nonlinear programming theory and algorithms* (2nd Edition). John Wiley Sons, Inc.
- Beaupré, G.S., Orr, T.E. e Carter, D.R. (1990), An approach for time-dependent bone modeling and remodeling-theoretical development. *Journal of Orthopaedic Research* 8, 651-661.
- Beckers, M. (1999), Topology optimisation using a dual method with discrete variables. *Struct Optim*, 17, 14-24.
- Bell, C. (1827), *Animal Mechanics, or proofs of design in the animal frame*. Morrill Wyman, Cambridge, MA.
- Bendsøe, M.P. e Kikuchi, N. (1988), Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 71: 197-224.
- Bendsøe, M.P. (1989), Optimal shape design as a material distribution problem. *Struct Optim* 1:193-202.
- Bendsøe, M.P. e Triantafyllidis, N. (1990), Scale effects in the optimal design of a microstructured medium against buckling. *Int J of Solids and Structures*, 26(7), 725-741.
- Bendsøe, M.P., Guedes, J.M., Haber, R.B., Pedersen, P. e Taylor, J.E. (1994), An analytical model to predict optimal material properties in the context of optimal design, *Transactions of the ASME, Journal of Applied Mechanics* 61, 4, 930-937.
- Bendsøe, M.P. e Sigmund, O. (1999), Material interpolations in topology optimization. *Arch. Appl. Mech.*, 69, 635-654.

- Bendsøe, M.P. e Sigmund, O. (2003), *Topology optimisation theory, methods and applications*. Springer, Berlin Heidelberg New York.
- Bensoussan, A., Lions, J.L. e Papanicolaou, G.C. (1978), *Asymptotic analysis for periodic structure*. North-Holland, Amsterdam.
- Bergmann, G., Siraky, J. e Rohlmann, A. (1984), A comparison of hip joint forces in sheep, dog and man. *Journal of Biomechanics*, 17, 12, 907-921.
- Bergmann, G., Rohlmann, A. e Graichen, F. (1990), Hip joint forces during physical therapy after joint replacement. *Transactions of the 36th Annual Meeting of the Orthopaedic Research Society*, New Orleans, L.A., 15, 2.
- Bergmann, G., Graichen, F. e Rohlmann, A. (1995), Is staircase walking a risk for the fixation of hip implants? *Journal of Biomechanics*, 28, 5, 535-553.
- Bergmann, G. (1998), *Hip98 – Loading of the hip joint*. Free University of Berlin. Compact disc, ISBN 3980784800.
- Bergmann, G., Graichen, F. e Rohlmann, A. (1999), Hip joint forces in sheep. *Journal of Biomechanics*, 32, 769-777.
- Bergmann, G., Deuretzbacher, G., Heller, M., Graichen, F., Rohlmann, A., Strauss, J. e Duda, G. (2001), Hip contact forces and gait patterns from routine activities. *Journal of Biomechanics*, 34, 859-871.
- Bitsakos, C., Kerner, J., Fisher, I. e Amis, A.A. (2005), The effect of muscle loading on the simulation of bone remodelling in the proximal femur. *Journal of Biomechanics*, 38, 133-139.
- Borrvall, T. e Petersson, J. (2001), Large-scale topology optimisation in 3D using parallel computing, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 190, 6201-6229.
- Bourguery, J.M. (1832), *Traite complet de l'anatomie de l'homme*. I. Osteologie. Paris.
- Brand, R.A., Crowninshield, R.D., Wittstock, C.E., Pedersen, D.R., Clark, C.R. e Van Krieken, F.M. (1982), A model of lower extremity muscular anatomy. *Journal of Biomechanical Engineering*, 104, 304-310.
- Brand, R.A., Pedersen, D.R. e Friederich, J.A. (1986), The sensitivity of muscle force predictions to changes in physiologic cross-sectional area. *Journal of Biomechanics*, 19, 8, 589-596.
- Brown, J.P. e Josse, R.G. (2002), Clinical practice guidelines for the diagnosis and management of osteoporosis in Canada. *CMAJ*, 167 (10 suppl).
- Brown, R.E. (2004), *Engineering a Beowulf-style computer cluster*. Duke University.

- Bryant, J.D. (1983), The effect of impact on the marrow pressure in long bones. *Journal of Biomechanics* 16, 659-665.
- Bryant, J.D. (1988), On the mechanical function of marrow in long bones. *Engineering in Medicine* 17, 55-58.
- Bryant, J.D. (1995), Hydraulic strengthening of bones. *Journal of Biomechanics* 28, pp 353-54.
- Budiansky, B. (1965), On the elastic moduli of some heterogeneous materials. *J. Mech Phys Solids*, 13, 223-227.
- Burgueño, R., Quagliata, M.J., Mohanty, A.K., Mehta, G., Drzal, L. e Mistra, M. (2005), Hierarchical cellular designs for load-bearing biocomposite beams and plates. *Materials Science and Engineering*, 390, 178-187.
- Burns, G., Daoud, R. e Vaigl, J. (1994), LAM: an open cluster environment for MPI, in Ross, J.W., ed.: *Proceedings of Supercomputing Symposium '94*, University of Toronto, 379-386.
- Canhão H., Fonseca J.E. *et al* (2005), Epidemiologia da Osteoporose: Mecanismos de Remodelação Óssea e Factores de Protecção do Osso. *Acta Reum Port*, 30, 225-40
- Carter, D.R. e Beaupré, G.S. (2001), *Skeletal function and form*. Cambridge University Press.
- Carter, D.R. e Hayes, W.C. (1976), Bone compressive strength: the influence of density and strain rate. *Science* 194:1174-76.
- Carter, D.R. e Hayes, W.C. (1977), The compressive behavior of bone as a two-phase porous structure. *Journal of bone and joint surgery* 59-A:954-62.
- Carter, D.R., Schwab, G.H. e Spengler, D.M. (1980), Tensile fracture of cancellous bone. *Acta orthopaedica Scandinavica* 51:733-41.
- Carter, D.R., Fyhrie, D.P. e Whalen, R.T. (1987), Trabecular bone density and loading history: regulation of tissue biology by mechanical energy. *Journal of Biomechanics* 20, 785-795.
- Carter, D.R., Orr, T.E. e Fyhrie, D.P. (1989), Relationships between loading history and femoral cancellous bone architecture. *Journal of Biomechanics* 22, 231-244.
- Carvalho, R. (2007), *Optimização hierárquica da topologia e do material em problemas térmicos*. Dissertação para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica. Instituto Superior Técnico. Universidade Nova de Lisboa.
- Chen, H.S. e Acrivos, A. (1978), The effective elastic moduli of composite materials containing spherical inclusions at non-dilute concentrations. *Int J Solids Structures*, 14, 349-364.

- Cherkaev, A.V. e Gibianski, L.V. (1993), Coupled estimates for the bulk and shear moduli of a two-dimensional isotropic elastic composite. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 41, 5, 937-980.
- Cherkaev, A.V. e Gibianski, L.V. (1996), Extremal structures of multiphase heat conducting composites. *Int J Solids Struct* 33(18):2609-2623.
- Chiandussi, G., Gaviglio, I. e Ibba, A. (2004), Topology optimization of an automotive component without final volume constraint specification. *Advances in Engineering Software*, 35, 609-617.
- Christensen, R.M. e Lo, K.H. (1979), Solutions for effective shear properties in three phase sphere and cylinder models. *J Mech Phys Solids*, 27, 315-330.
- Clough, R.W. (1960), The finite element method in plane stress analysis. *Proceedings of the 2nd Conference on Electronic Computation*. New York: American Society of Civil Engineering, pp. 345-378.
- Coelho, P.G. (2003), Meta-heurísticas aplicadas em otimização estrutural. Trabalho de Síntese no âmbito das Provas de Aptidão e Capacidade Científica, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa, Portugal.
- Coelho, P.G., Fernandes, P.R., Guedes, J.M., Reis, N. e Rodrigues, H.C. (2005), A hierarchical model for bone remodelling - Application to scaffold design. *II International Conference on Computational Bioengineering*. H. Rodrigues et al. (Eds.), Lisbon, Portugal, September 14-16.
- Coelho, P.G., Fernandes P., Cardoso, J.B., Guedes, J.M. e Rodrigues, H.C. (2006), Three-dimensional hierarchical model for topology optimisation of structures. *III European Conference on Computational Mechanics Solids, Structures and Coupled Problems in Engineering*. C.A. Mota Soares et al. (eds), Lisbon, Portugal, 5-8 June.
- Coelho, P.G., Fernandes P., Guedes, J.M. e Rodrigues, H.C. (2007a), Algorithmic strategies for the hierarchical topology optimization of structures. *WCSMO 7, COEX*, Seul, South-Korea.
- Coelho, P.G., Fernandes P., Guedes, J.M., Rodrigues, H.C. e Cardoso, J.B. (2007b), Análise de estratégias de otimização em problemas de topologia multiescala para estruturas tridimensionais. *CMNE/CILAMCE*, Porto, 13 a 15 de Junho.
- Coelho, P.G., Fernandes P., Cardoso, J.B., Guedes, J.M. e Rodrigues, H.C. (2007c), Simulação computacional da remodelação óssea utilizando um modelo de otimização multi-escala. *2º Encontro Nacional de Biomecânica*. H. Rodrigues *et al.* (Eds.), Évora, Portugal, 8 e 9 de Fevereiro.
- Coelho, P.G., Fernandes P., Cardoso, J.B., Guedes, J.M. e Rodrigues, H.C. (2007d), Computer simulation of bone remodelling using a multi-scale optimization model with porosity constraints,

- III International Congress on Computational Bioengineering, Cerrolaza *et al.* (Eds.), Isla de Margarita, Venezuela, September 17to 19.
- Coelho, P.G., Fernandes P., Guedes, J.M. e Rodrigues, H.C. (2008a), A hierarchical model for concurrent material and topology optimisation of three-dimensional structures. *Struct Multidisc Optim*, 35:107-115.
- Coelho, P.G., Fernandes P., Guedes, J.M. e Rodrigues, H.C. (2008b), Hierarchical topology optimisation of structures subjected to constraints on material design, *EngOpt2008 – International Conference on Engineering Optimisation*, Rio de Janeiro, Brazil, 1-5 June.
- Coelho, P.G., Cardoso, J.B., Fernandes P. e Rodrigues, H.C. (2009a), Parallel Computing Techniques Applied to the Simultaneous Design of Structure and Material. *PARENG2009*, Pécs, 6-8 April, Hungary.
- Coelho, P.G., Fernandes P., Rodrigues, H.C., Cardoso, J.B. e Guedes, J.M. (2009b), Numerical modelling of bone tissue adaptation - A hierarchical approach for bone apparent density and trabecular structure. *Journal of Biomechanics*, 42: 830-837.
- Cowin, S.C. (1976), Bone remodelling. I: A theory of adaptive elasticity. *Journal of Elasticity*, 6, 313-325.
- Cowin, S.C. (1999), Bone poroelasticity. *Journal of Biomechanics*, 32, 217-238.
- Cowin, S.C. (2001), *Bone mechanics handbook*. 2nd ed. New York, CRC Press.
- Cristofolini, L., Viceconti, M., Toni, A. e Giunti, A. (1995), Influence of thigh muscles on the axial strains in a proximal femur during early stance in gait. *Journal of Biomechanics*, 28, 5, 617-624.
- Crowninshield, R.D. e Brand, R.A. (1981), A physiologically based criterion of muscle force prediction in locomotion. *Journal of Biomechanics*, 14, 11, 793-801.
- Currey, J.D. (2002), *Bones: structure and mechanics*. Princeton University Press. Princeton and Oxford.
- Devries, F., Dumontet, H., Duvaut, G. e Lene, F. (1989), Homogenization and damage for composite structures. *Int J for Num Meth Eng*, 27, 285-298.
- Diaz, A. e Bendsoe, M. (1992), Shape Optimization of Structures for Multiple Loading Conditions Using a Homogenization Method, *Structural Optimization* 4, pp. 17-22.
- Diaz, A. e Sigmund, O. (1995), Checkerboard patterns in layout optimisation. *Structural optimisation*, 10(1): 40-45.

- Diaz, A. e Lipton, R. (1997), Optimal material layout for 3D elastic structures. *Structural Optimization*, 13, 60-64.
- Diaz, A. e Lipton, R. (2000), Optimal material layout in three-dimensional elastic structures subjected to multiple loads. *Mech. Struct. & Mach.*, 28(2,3),219-236.
- Diaz, A.R. e Bernard, A. (2003), Designing materials with prescribed elastic properties using polygonal cells. *Int J Numer Methods Eng*, 57(3):301-314.
- Dillaman, R.M., Roer R.D. e Gay D.M. (1991), Fluid Movement in bone: theoretical and empirical, *J. Biomechanics*, Vol 24, pp.163-177.
- Doblaré, M. e Garcia, J.M. (2001), Application of an anisotropic bone-remodelling model based on a damage-repair theory to the analysis of the proximal femur before and after total hip replacement. *Journal of Biomechanics* 34, 1157-1170.
- Doblaré, M. e Garcia, J.M. (2002), Anisotropic bone remodelling model based on a continuum damage-repair theory. *Journal of Biomechanics* 35, 1-17.
- Dorn, W.C., Gomory R.E. e Greenberg H.J. (1964), Automatic design of optimal structures, *J. Mech.*, 3:25-52.
- Dostal, W.F. e Andrews, J.G. (1981), A three-dimensional biomechanical model of hip musculature. *Journal of Biomechanics*, 14, 11, 803-812.
- DTU/Ph.D.-course/Advanced school (2008), Scientific Computing: Fortran and MPI, DCAMM, Technical University of Denmark, Lyngby, Denmark, January 7th – 25th.
- Duda, G.N. (1996), Influence of muscle forces on the internal loads in the femur during Gait. PhD Thesis, Berlin.
- Duda, G.N., Brand, D., Freitag, S., Lierse, W. e Schneider, E. (1996), Variability of femoral muscle attachments. *Journal of Biomechanics*, 29,9,1185-1190.
- Duda, G.N. (1997), Internal forces and moments in the femur during walking. *Journal of Biomechanics*. 30, 9, 933-941.
- Duda, G.N, Heller, M. Albinger, J., Schulz, O., Schneider, E. e Claes, L. (1998), Influence of muscle forces on femoral strain distribution. *Journal of Biomechanics*, 31, 841-846.
- Eschenauer, H.A., Kobelev, V. e Schumacher, A. (1994), Bubble method for topology and shape optimization of structures. *Struct Optim*, 8:42-51.

- Eschenauer, H.A. e Olhoff, N. (2001), Topology optimization of continuum structures: A review. *Appl Mech Rev*, 54,4,331-389.
- Evgrafov, A., Rupp, C.J., Maute, K. e Dunn, M.L. (2008), Large-scale parallel topology optimisation using a dual-primal substructuring solver. *Struct Multidis Optim*, 36, 329-345, 2008.
- Fazzalari, N.L., Crisp, D.J. e Vernon-Roberts, B. (1989), Mathematical modeling of trabecular bone structure: the evaluation of analytical and quantified surface to volume relationships in the femoral head and iliac crest. *Journal of Biomechanics* 22, 901-910.
- Fernandes, P., Guedes, J.M. e Rodrigues, H. (1999a), Topology optimization of three-dimensional linear elastic structures with a constraint on perimeter. *Computer and Structures* 73, 583-594.
- Fernandes, P., Rodrigues, H. e Jacobs, C. (1999b), A model of bone adaptation using a global optimizations criterion based on the trajectorial theory of Wolff. *Comp. Meth. Biomech and Biomed Eng*, Vol 2, pp. 125-138.
- Feyel, F. e Chaboche, J.L. (2000), FE^2 multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC/Ti composite materials. *Comput Meth Appl Mech Engrg*, 183, 309-330.
- Fish, J. e Shek, K. (2000), Multiscale of composite materials and structures. *Composites Science and Technology*, 60, 2547-2556.
- Fletcher, R. (1987), *Practical methods for optimisation*. Wiley, Chichester.
- Fox, R.L. (1965), Constraint surface normals for structural synthesis techniques, *AIAA J.*, 3, (8), 1517-1518.
- Frost, H.M. (1964), *The laws of bone structure*. Thomas, Springfield.
- Frost, H.M. (1987), Bone “mass” and the “mechanostat”: A proposal. *Anat Rec*, 219:1-9.
- Fujii, D., Chen, B.C. e Kikuchi, N. (2001), Composite material design of two-dimensional structures using the homogenisation design method. *Int J Num Meth Eng*, 50:2031-2051.
- Fung, Y.C. (1993), *Bone e Cartilage*. Ed. *Biomech Mech proper. of living tissues*. NY: Springer-Verlag, 500-544.
- Fyhrie, D. e Carter, D. (1986), A unifying principle relating stress to trabecular bone morphology, *Journal of Orthopaedic research*, 4, 304-317
- Fyhrie, D.P. Fazzalari, N.L. Goulet R. e Goldstein, S.A. (1993), Direct calculation of the surface-to-volume ratio for human cancellous bone. *Journal of Biomechanics* 26, 955-967.

- Fyhrie, D.P., Lang, S.M., Hoshaw, S.J., Shaffler M.B. e Kuo, R.F. (1995), Human Vertebral Cancellous bone surface distribution. *Bone* 17, 287-291.
- Galileo, G.L. (1638), *Discorsi e dimonstrazioni matematiche*, intorno a due nuove scienze attentanti alla meccanica ed a muovimenti locali. University of Wisconsin Press, Madison.
- Gallagher, R.H. (1977), Fully stress design. *Opt Struct Des*: 19-32
- Ganapathysubramanian, B. e Zabaras, N. (2008), Modeling multiscale diffusion processes in random heterogeneous media. *Comput Meth Appl Mech Engrg*, 197, 3560-3573.
- Garcia-Aznar, J.M., Rueberg, T. e Doblaré, M. (2005), A bone remodelling model coupling microdamage growth and repair by 3D BMU-activity. *Biomechanics and Modeling Mechanobiology* 4, 147-167.
- Gellatly, R.A., Gallagher, R.H. e Lubracki, W.A. (1964), Development of a procedure for automated synthesis of minimum weight structures, Air Force Flight Dynamics Lab. Rept. AFFDL TDR 64-141.
- Gellatly, R.A. e Gallagher, R.H. (1965), Development of Advanced Structural Optimization Programs and Their Application to Large Order Systems, Proc. Conf. Matrix Methods Struct. Mech., Wright-Patterson Air Force Base, Ohio, Oct. 26-28.
- Gellatly, R.A. e Gallagher, R.H. (1966), A procedure for automated minimum weight structural design, I. Theoretical Basis, *Aeronaut. Quart.*, 17: 216-230.
- Ghosh, S., Lee, K. e Moorthy, S. (1995), Multiple scale analysis of heterogeneous elastic structures using homogenisation theory and voronoi cell finite element method. *Int J Solids Structures*, Vol. 32, No. 1, pp. 27-62.
- Ghosh, S., Lee, K. e Raghavan, P. (2001), A multi-level computational model for multi-scale damage analysis in composite and porous materials. *Int J of Solids and Structures*, 38, 2335-2385.
- Gibiansky, L.V. e Sigmund O. (2000), Mutiphase composites with extremal bulk modulus. *J. Mech. Phys. Solids*, 48, pp.461-498.
- Gibson, L.J. (1985), The mechanical behaviour of cancellous bone. *Journal of Biomechanics*, 18, 317-328.
- Gibson, L.J. and Ashby, M. (1988), *Cellular solids, structure and properties*. Pergamon Press, Oxford, England.
- Glover, F. (1986), Future paths for integer programming and links to artificial intelligence. *Computers and Operations Research*, 13, 533-549.

- Grama, A., Karypis, G., Kumar, V. e Gupta, A. (2003), An introduction to parallel computing: design and analysis of algorithms. Addison-Wesley, Reading.
- Gross K.A. e Rodríguez-Lorenzo L.M. (2004), Biodegradable composite scaffolds with an interconnected spherical network for bone tissue engineering, *Biomaterials*, Vol. 25, pp.4955-4962.
- Guedes, J.M. e Kikuchi, N. (1990), Preprocessing and postprocessing for materials based on the homogenisation method with adaptive finite element methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 83, 143-198.
- Guedes, J.M. (1995), User's manual for the program PREMAT3D, Version 3.8, Relatório IDMEC/CPM – 95/026.
- Guedes, J.M., Rodrigues, H.C. e Bendsøe, M.P. (2003), A material optimisation model to approximate energy bounds for cellular materials under multiload conditions. *Int. Journal Structural and Multidisciplinary Optimization*, 25 (5-6), pp.446-452.
- Guest, J.K. e Prévost, J.H. (2006), Optimizing multifunctional materials: design of microstructures for maximized stiffness and fluid permeability. *Int J of Solids and Structures*, 43, 7028-7047.
- Guest, J.K. e Prévost, J.H. (2007), Design of maximum permeability material structures. *Comput Meth Appl Mech Engrg*, 196, 1006-1017
- Guidault, P.A., Allix, O., Champaney, L. e Navarro, J.P. (2007), A two-scale approach with homogenisation for the computation of cracked structures. *Computers and Structures*, 85: 1360-1371.
- H**aber, R.B., Jog, C.S. e Bendsøe, M.P. (1994), Variable-topology shape optimisation with a control on perimeter. In: Gilmore, B.J.; Hoeltzel, D.A.; Dutta, D.; Eschenauer, H.A. (eds) *Advances in design automation*, pp. 261-272. Washington D.C.: AIAA.
- Haber, R.B, Jog, C.S. e Bendsøe, M.P. (1996), A new approach to variable-topology shape design using a constraint on perimeter. *Struct Optim*, 11, 1-12.
- Haftka, R.T. e Grandhi, R.V. (1986), Structural shape optimization – A survey, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 57 (1), 91-106.
- Hajela, P. e Lee, E. (1995), Genetic algorithms in truss topology optimisation. *Int J Solids Struct*, 32: 3341-3357.
- Hart, R.T., Davy, D.T. e Heiple, K.G. (1984), A computational model for stress analysis of adaptive elastic materials with a view toward applications in strain-induced bone remodeling. *Journal of Biomechanical Engineering*, 106, 342-350.

- Hart, R.T. e Fritton, S.P. (1997), Introduction to finite element based simulation of functional adaptation of cancellous bone. *Forma* 12, 277-299.
- Hart, R.T. (2001), Bone modeling and remodeling: Theories and Computation. In: Cowin, S.C. (Eds), *Bone Mechanics Handbook*, 2nd Edition. CRC Press, pp.31.1-31.42.
- Hashin, Z. e Shtrikman, S. (1962), A variational approach to the theory of effective magnetic permeability of multiphase materials. *J. Applied Physics*, 33(10), pp.3125-3131.
- Hashin, Z. e Shtrikman, S. (1963), A variational approach to the theory of elastic behaviour of multiphase materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 11, pp.127-140.
- Hassani, B. e Hinton, E. (1998), A review of homogenisation and topology optimisation I – homogenisation theory for media with periodic structure. *Computers and Structures*, 69, 707-717.
- Hazelwood, S.J., Martin, R.B., Rashid, M.M. e Rodrigo, J.J. (2001), A mechanistic model for internal bone remodeling exhibits different dynamic responses in disuse and overload. *Journal of Biomechanics* 34, 299-308.
- Heinz, W. e Folgeman, I. (1994), *The evaluation of osteoporosis: dual energy X-ray absorptiometry in clinical practice*. London: Martin Dunitz.
- Heller, M.O., Bergmann, G., Deuretzbacher, G., Durselen, L, Pohl, M., Claes, L., Haas, N.P. e Duda, G.N. (2001), Musculo-skeletal loading conditions at the hip during walking and stair climbing. *Journal of Biomechanics*, 34, 883-893.
- Hernandez, C.J., Beaupré, G.S. e Carter, D.R. (2000), A model of mechanobiologic and metabolic influences on bone adaptation. *Journal Rehabilitation Research and Development* 37, 235-244.
- Hernandez, C.J. (2001), *Simulation of bone remodeling during the development and treatment of osteoporosis*. PhD thesis, Stanford University, Stanford, CA.
- Hernandez, C.J. e Keaveny, T.M. (2006), A biomechanical perspective on bone quality. *Bone*, 39, 1173-81.
- Herrera, J.A., Aznar, J.M. e Doblare, M. (2008), A mathematical model for bone tissue regeneration inside a specific type of scaffold. *Biomech. Model. Mechanobiol.*, 7: 355-366.
- Hill, R. (1965), A Self consistent mechanics of composite materials. *J Mech Phys Solids*, 13, 213-222.
- Hillsley M.V. e Frangos, J.A. (1994), Review: Bone Tissue Engineering: The Role of Interstitial Fluid Flow, *Biotechnology and Bioengineering*, Vol. 43, pp. 573-581.
- Hinton, E. e Sienz, J. (1995), Fully stressed topological design of structures using an evolutionary procedure. *Engineering Computational*, 12: 229-244.

- Hollister, S.J. Maddox, R.D. e Taboas, J.M. (2002), Optimal design and fabrication of scaffolds to mimic tissue properties and satisfy biological constraints. *Biomaterials*, Vol 23, pp. 4095-4103.
- Hollister, S.J. e Lin, C.Y. (2007), Computational design of tissue engineering scaffolds. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 196: 2991-2998.
- Hori, M. e Nemat-Nasser, S. (1993), Double inclusion model and overall moduli of multiphase composites. *Mech Mater*, 14, 189-206.
- Huang, X. e Xie, Y.M. (2008), Optimal design of periodic structures using evolutionary topology optimisation. *Struct Multidisc Optim*, 36: 597-606.
- Huiskes, R., Weinans, H., Grootenboer, H.J., Dalstra, M., Fudala, B., Sloof, T.J., (1987), Adaptive bone-remodeling theory applied to prosthetic-design analysis. *Journal of Biomechanics* 20, 1135-1150.
- Huiskes, R., Ruimerman, R., GH van Lenthe e Janssen, J.D. (2000), Effects of mechanical forces on maintenance and adaptation of form in trabecular bone. *Nature* 405, 704-706.
- Hutmacher, D. W., Sittering, M. e Risbud, M. V. (2004), Scaffold-based tissue engineering: rationale for computer-aided design and solid free-form fabrication systems. *Trends in Biotechnology*, 22 (7) pp.354-362.
- I**brahimbegovic, A. e Markovic, D. (2003), Strong coupling methods in multi-phase and multi-scale modelling of inelastic behaviour of heterogeneous structures. *Comput Meth Appl Mech Engrg* 192, 3089-3107.
- J**acobs, C.R., Simo, J.C., Beaupré, G.S. e Carter, D.R. (1997), Adaptive bone remodeling incorporating simultaneous density and anisotropy considerations. *Journal of Biomechanics* 30, 603-613.
- Jacobs, C.R. (2000), The mechanobiology of cancellous bone structural adaptation. *Journal of Rehabilitation Research and Development*, Vol. 37, No. 4, pp. 209-216.
- Jacobsen J.B., Olhoff, N. e Rønholt, E. (1998), Generalized shape optimisation of three-dimensional structures using materials with optimum microstructures. *Mechanics of Materials*, 28, 207-225.
- Jang, In G. e Kim, Il Yong (2008), Computational study of Wolff's law with trabecular architecture in the human proximal femur using topology optimization. *Journal of Biomechanics*, 41: 2353-2361.
- Jang, In G. e Kim, Il Yong (2009), Computational simulation of trabecular adaptation progress in human proximal femur during growth. *Journal of Biomechanics*, 42: 573-580.

- Jog, C.S., Haber, R.B. e Bendsøe, M.P. (1994), Topology design with optimised, self-adaptive materials. *Int. J. Numerical Methods in Engineering*, 37, 1323-1350.
- Jog, C.S. e Haber, R.B. (1996), Stability of finite element models for distributed-parameter optimisation and topology design. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 130(3-4):203-226.
- Jog, C.S. (2002), Topology design of structures using a dual algorithm and a constraint on the perimeter. *Int J Num Meth Engrg*, 54, 1007-1019.
- Kabel, J., Rietbergen, B., Dalstra M., Odgaard, A., e Huijskes, R. (1999) The role of an effective isotropic tissue modulus in the elastic properties of cancellous bone, *Journal of Biomechanics*, 32, 673-680.
- Kalamkarov, A.L. e Kolpakov, A.G. (1997), Analysis, design and optimisation of composite structures. Wiley, Chichester, UK.
- Kang, H. e Hollister, S.J. (2007), Optimal design of 3D tissue engineering scaffolds to achieve tissue mechanical properties with constrained diffusivity. WCSMO7, Coex Seoul, 21 May – 25 May, Korea.
- Keaveny, T. M., Morgan, E.F., Niebur, G.L. e Yeh, O.C. (2001), Biomechanics of trabecular bone. *Annual Review of Biomedical Engineering* 3, 307-333.
- Keller, J.B. (1980), Darcy's law for flow in porous media and the two phase method, in: R.L. Stenberg, A.J. Kalinowski and J.S. Papadakis, eds., *Nonlinear Partial Differential Equations in Engineering and Applied Science* (M. Dekker, New York, Office of Naval Research), 429-443.
- Kessler, S.S. e Greenkorn, R.A. (1999), Momentum, heat, and mass transfer fundamentals. Marcel Dekker, Inc., NY.
- Kim, T.S., Kim, J.E. e Kim Y.Y. (2004), Parallelized structural topology optimisation for eigenvalue problems. *International Journal of Solids and Structures*, 41, 2623-2641.
- Koch, J.C. (1917), The laws of bone architecture. *American journal of anatomy*, 21: 17-293.
- Kohles, S.S. (2000), Applications of an anisotropic parameter to cortical bone. *Journal of Material Science: Materials in Medicine*, 11(4): 261-265.
- Kohles, S.S., Roberts, J.B., Upton, M.L., Wilson, C.G., Bonassar, L.J. e Schlichting, A.L. (2001), Direct perfusion measurements of cancellous bone anisotropic permeability. *J. Biomechanics*, 34: 1197-1202.

- Kohles, S.S. e Roberts, J.B. (2002), Linear poroelastic cancellous bone anisotropy: trabecular solid elastic and fluid transport properties. *J. Biomech. Eng.*, 124:521-526.
- Kotzar, G.M., Davy, D.T., Goldberg, V.M., Heiple, K.G., Berilla, J., Heiple, K.G. Jr, Brown, R.H. e Burstein, A.H. (1991). Telemeterized in vivo hip joint force data on two patients after total hip surgery. *J. Orth. Res.*, 9, 621-633.
- Kouznetsova, V., Geers, M.G.D. e Brekelmans, W.A.M. (2002), Multiscale constitutive modelling of heterogeneous materials with a gradient-enhanced computational homogenisation scheme. *Int J Num Meth Eng*, 54:1235-1260.
- Kröner, E. (1986), In modelling small deformations of polycrystals, Chap. 8, edited by J. Gittus and J.Zarka. Elsevier, London.
- Kuiper, J.H. (1993), Numerical optimisation of artificial hip joint designs. PhD Thesis, University of Nijmegen, Nijmegen, Holland.
- Kumar, V., Grama, A., Gupta A. e Karypis G. (1994), Introduction to parallel computing, The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc.
- Ladevèze, P., Loiseau, O. e Dureisseix, D. (2001), A micro-macro and parallel computational strategy for highly heterogeneous structures. *Int J Num Meth Eng*, 52:121-138.
- Ladevèze, P. e Nouy, A. (2003), On a multiscale computational strategy with time and space homogenisation for structural mechanics. *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 192, 3061-3087.
- Li, Q., Steven, G.P. e Xie, Y.M. (2000), Evolutionary structural optimisation for stress minimisation problems by discrete thickness design. *Comput Struct*, 78:769-80.
- Lin, C.Y., Kikuchi N. e Hollister S.J. (2004), A novel method for biomaterial scaffold internal architecture design to match bone elastic properties with desired porosity. *Journal of Biomechanics*, Vol. 37, pp. 623-636.
- Linde, F. (1994), Elastic and viscoelastic properties of trabecular bone by a compression testing approach, *Dan. Med. Bull.*, 41,119.
- Lions, J.L. (1981), Some methods in mathematical analysis of systems and their control. Kexue Chubanshe Science Press, Beijing, and Gordon and Breach, London.
- Lipton, R. e Northrup, J. (1994), Optimal bounds on the inplane shear moduli for orthotropic elastic composites. *SIAM J Appl Math* 54(2):428-442.
- Lucas, G., Cook, F. e Friis, E. (1999), A Primer of Biomechanics. Springer-Verlag, NY.

- Lucchinetti, E. (2001), Composite model of bone properties. In: Cowin, S.C. (Eds), Bone Mechanics Handbook, 2nd edition. CRC Press, pp. 12.1-12.19.
- Luenberger, D.G. (1989), Linear and nonlinear programming (2nd edition). Addison-Wesley Publishing Company. Reading, Massachusetts.
- Lutolf, M.P. e Hubbell, J.A. (2005), Synthetic biomaterials as instructive extracellular microenvironments for morphogenesis in tissue engineering. *Nature Biotechnology* 23 (1) pp.47-55.
- M**ahdavi, A., Balaji, R., Frecker, M. e Mockensturm, E.M. (2006), Topology optimisation of 2D continua for minimum compliance using parallel computing. *Struct Multidisc Optim*, 32, 121-132.
- Malard, J. (1996), MPI: a Message Passing Interface standard, history, overview and current status. Technology Watch Report, Edinburgh Parallel Computing Center.
- Martin, R.B. (1984), Porosity and specific surface of bone, *CRC Critical Reviews in Biomedical Engineering* 10, 179-222.
- Martin, R.B. (1995), A mathematical model for fatigue damage repair and stress fracture in osteonal bone. *Journal Orthopaedic Research* 13, 309-316.
- Martin, R.B., Burr, D.B. and Sharkey, N.A. (1998), *Skeletal tissue mechanics*. Springer-Verlag New York, Inc.
- Matsui, K., Terada, K. e Yuge, K. (2004), Two-scale finite element analysis of heterogeneous solids with periodic microstructures. *Computers and Structures*, 82, 593-606.
- Maxwell, C. (1890), On reciprocal figures, frames and diagrams of forces. *Scientific Papers*, vol 2, pp. 175-177.
- Message Passing Interface Forum (1994), MPI: a Message Passing Interface standard. *International Journal of Supercomputer Applications and High Performance Computing*, 8 (Special issue on MPI).
- Meyer, G.H. (1867), Die Architektur der spongiosa. *Archief fur den anatomischen und physiologischen Wissenschaften im Medicin* 34, 615-628.
- Michel, J.C., Moulinec, H. e Suquet, P. (1999), Effective properties of composite materials with periodic microstructures: a computational approach. *Comput Methods Appl Mech Engrg*, 172, 109-143.
- Michell, A.G.M. (1904), The limit of economy of material in frame structures. *Philosophical Magazine*, Series 6, 8, pp. 589-597.

- Miehe, C. e Bayreuther, C.G. (2007), On multiscale FE analyses of heterogeneous structures: from homogenisation to multigrid solvers. *Int J Num Meth Eng*, 71:1135-1180.
- Mikos, A. G. e Temenhoff, J.S. (2000), Formation of highly porous biodegradable scaffolds for tissue engineering. *EJB Electronic Journal of Biotechnology*, Vol 3, No. 2, (2000).
- Mullender, M.G., Huiskes, R. e Weinans, H. (1994), A Physiological approach to the simulation of bone remodeling as a self-organisational control process. *Journal of Biomechanics* 27, 1389-1394.
- Mura, T. (1987), *Micromechanics of defects in solids*. 2nd Edition. Kluwer Academic Publishers.
- Nauman, E.A., Fong, K.E. e Keaveny, T.M. (1999), Dependence of intertrabecular permeability on flow direction and anatomic site. *Annals of Biomedical Engineering*, 27: 517-524.
- Nemat-Nasser, S. e Hori, M. (1993), *Micromechanics: overall properties of heterogeneous materials*. Elsevier: Amsterdam.
- Nemat-Nasser, S., Yu, N. e Hori, M. (1993), Bounds and estimates of overall moduli of composites with periodic microstructures. *Mech Mater*, 15, 163-181.
- Neves, M.M., Rodrigues, H. e Guedes, J.M. (2000), Optimal design of periodic linear elastic microstructures. *Computers and Structures*, 76, 421-429.
- Neves, M.M., Sigmund, O. e Bendsøe, M.P. (2002) Topology optimisation of periodic microstructures with a penalization of highly localized buckling modes. *Int J Numer Methods Eng*, 54(6):809-834.
- Norato, J.A, Bendsøe, M.P., Haber, R.B. e Tortorelli, D.A. (2007), A topological derivative method for topology optimisation. *Struct Multidisc Optim*, 33:375-386.
- Olhoff, N. (1996), On optimum design of structures and materials. *Meccanica* 31: 143-161.
- Olhoff, N. e Rozvany, G.I.N. (eds) (1995), *First World Congress of Structural and Multidisciplinary Optimization*, Pergamon.
- Olhoff, N., Rønholt, E. e Scheel, J. (1998), Topology optimisation of three-dimensional structures using optimum microstructures. *Structural Optimization* 16, 1-18.
- Ottosen, N.S. e Ristinmaa, M. (2005), *The mechanics of constitutive modelling*. Elsevier, Oxford, UK.
- Paley, M. e Aboudi, J. (1992), Micromechanical analysis of composites by generalized cells method. *Mech Mater*, 147, 126-139.
- Papadrakakis, M., Lagaros, N.D., Tsompanakis, Y. e Plevris, V. (2001), Large scale structural optimisation: computational methods and optimisation algorithms. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 8, 3, 239-301.

- Parfitt, A.M., Mathews, C.H., Villanueva, A.R., Kleerekoper, M., Frame B. e Rao, D.S. (1983), Relationships between surface, volume, and thickness of iliac trabecular bone in aging and in osteoporosis. *Journal Clinical Investigation* 72, 1396-1409.
- Paulino, G.H., Silva, E.C.N. e Le, C.H. (2008), Optimal design of periodic functionally graded composites with prescribed properties. *Struct Multidisc Optim*, DOI 10.1007/s00158-008-0300-1.
- Pauwels, F. (1965), *Gesammelte Abhandlungen zur funktionellen anatomie des bewegungsapparates*. Springer, Berlin.
- Pecullan, S., Gibiansky, L.V. e Torquato, S. (1999), Scale effects on the elastic behavior of periodic and hierarchical two-dimensional composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 47, 1509-1542.
- Pedersen, D.R., Brand, R.A. e Davy, D.T. (1997), Pelvic muscle and acetabular contact forces during gait. *Journal of Biomechanics*, 30, 9: 959-965.
- Pettermann, H.E., Reiter T.J. e Rammerstorfer, F.G. (1997), Computational Simulation of Internal Bone Remodeling. *Archives of Computational Methods in Engineering*, Vol.4, No. 4, pp. 295-323.
- Prendergast, P.J. e Taylor, D. (1994), Prediction of bone adaptation using damage accumulation. *Journal of Biomechanics* 27, 1067-1076.
- Przemieniecki, J.S. (1968), *Theory of Matrix Structural Analysis*. McGraw-Hill, New York.
- R**aghavan, P. e Ghosh, S. (2004), Concurrent multiscale analysis of elastic composites by a multi-level computational model. *Comput Meth Appl Mech Engrg*, 193, 457-538.
- Rajan, S.D., Belegundu, A.D., Damle, A.S. and Lau, D. (2008), Two-level parallelization for finite-element based design optimisation via case studies. *Optim Eng*, 9, 69-93.
- Reuss, A. (1929), Berechnung der Fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle. *Z. Angew Math Mech*, 9, 49-58.
- Rietbergen, B.V. Huiskes, R. Eckstein F. e Ruegsegger P. (2003), Trabecular bone tissue strains in the healthy and osteoporotic human femur, *Journal of Bone and Mineral Research*, 18, 10, 1781-188.
- Rigutti, A., Sayalero, M., Andriulli, A.G., Ghermana, A.A., Cetverikova, O.A., Albisetti, E. E Mannuci, B. (2008), *Atlas ilustrado de anatomia (título original: Atlante di anatomia)*, Giunti Gruppo Editoriale, Firenze-Milano. Editado em Portugal por Girassol Eds, Lda.
- Ringertz, U. (1993), On finding the optimal distribution of material properties. *Struct Optim*, 5, 265-267.

- Rixen, D. e Magoulès, F. (2007), Domain decomposition methods: Recent advances and new challenges in engineering. *Comput Meth Appl Mech Engrg*, 196, 1345-1346.
- Rodrigues, H. e Fernandes, P. (1993), Topology optimization of linear elastic structures subjected to thermal loads. In M.P. Bendøe & C.A. Mota Soares (eds), *Topology Design of Structures*, Kluwer Academic Publishers, pp. 437-450.
- Rodrigues, H., Soto, A. e Taylor, J.E. (1999a), A design model to predict optimal two-material composite structures.
- Rodrigues, H., Jacobs, C., Guedes J. e Bendsøe, M. (1999b), Global and local material optimization applied to anisotropic bone adaptation. In. P. Perdersen and M.P. Bendsoe (Eds), *Synthesis in Bio Solid Mechanics*, ISBN 0-7923-5615-2, Kluwer Academic Publishers, 209-220.
- Rodrigues, H., Guedes, J.M. e Bendsøe, M.P. (2002), Hierarchical optimisation of material and structure. *Struct Multidisc Optim* 24, 1-10.
- Roux, W. (1881), *Der zuchtende kampf der teile, oder die "teilauslese" im organismus (Theorie der "funktionellen anpassung")*. Wilhelm Engelmann, Leipzig.
- Rozvany G.I.N., Zhou, M. e Birker, T. (1992), Generalized shape optimisation without homogenisation. *Struct Optim*, 4: 250-254.
- Rozvany G.I.N., Bendsøe M.P. e Kirsch U. (1995), Layout optimisation of structures, *Appl. Mech. Rev.*, 48, 41-119.
- Rozvany G.I.N. (2009), A critical review of established methods of structural topology optimisation. *Struct Multidisc Optim*, 37: 217-237.
- Rubinstein, J. e Torquato, S. (1989), Flow in random porous media: mathematical formulation, variational principles, and rigorous bounds, *J. Fluid Mech.* 206, 25-46.
- Sachlos, E. e Czernuszka, J.T. (2003), Making tissue engineering scaffolds work: Review on the application of Solid Freeform Fabrication technology to the production of tissue engineering scaffolds. *European Cells and Materials*, Vol 5 p. 29-40.
- Sanchez-Palencia, E. (1980), *Non-homogeneous media and vibration theory*. Lecture Notes in Physics, Vol 127, Springer, Berlin.
- Santos, L., Coelho, P.G., Fonseca, J.E., Rodrigues, H.C. e Fernandes, P.R. (2008), A dual energy X-ray absorptiometry validation of a bone remodelling model for the assessment of osteoporotic bone quality. *Proceedings of the Sixth International Conference on Engineering Computational Technology*, M. Papadrakakis and B.H.V. Topping (Editors), Civil-Comp Press, Stirlingshire, Scotland.

- Scheidegger, A.E. (1974), *The physics of flow through porous media*. University of Toronto Press, Toronto, Canada.
- Schittkowski, K., (1985), NLQPL: A FORTRAN-Subroutine Solving Constrained Nonlinear Programming Problems. *Annals of Operations Research*, Vol. 5, pp 485-500.
- Schmit, L.A. (1960), Structural design by systematic synthesis, *Proc. 2d Conf. Electron. Computation ASCE*, Pittsburgh, Pa., pp.105-132, Sept. 8-9.
- Schmit, L.A. e Mallet, R.H. (1963), Structural synthesis and design parameter hierarchy, *J. Struct. Div. ASCE*, 89(ST4):269-299.
- Schmit, L.A. (1964), Comment on “Completely Automatic Weight-minimization Method of High-speed Digital Computers” by G.C. Best, *J. Aircraft*, 1:375-377.
- Schmit, L.A. e Fox, R.L. (1965), An integrated approach to structural synthesis and analysis, *J. Am. Inst. Aeron. Astron.*, 3:1104-1112.
- Sethian, J.A. e Wiegman, A. (2000), Structural boundary design via level set and immersed interface methods. *J Comp Phys* 163:489-528.
- Shipman, P., Walker, A. e Bichell, D. (1985), *The human skeleton*. Harvard University Press, Massachusetts.
- Sigmund, O. (1994), Design of material structures using topology optimisation. DCAMM Technickak University of Denmark, report S 69, December.
- Sigmund, O. (1995), Tailoring materials with prescribed elastic properties. *Mech Mater*, 20(4): 351-368.
- Sigmund, O. e Torquato, S. (1997), Design of materials with extreme thermal expansion using a three-phase topology optimisation method. *J. Mech. Phys. Solids*, 45 (6), pp.1037-1067.
- Sigmund, O. e Petersson, J. (1998), Numerical instabilities in topology optimisation: a survey on procedures dealing with checkerboards, mesh-dependencies and local minima. *Struct Multidisc Optim* 16: 68-75.
- Sigmund, O. (1999), On the optimality of bone structure. *Proc. of IUTAM Symposium on Synthesis in Bio Solid Mechanics*, Copenhagen, Denmark, 221-233
- Sigmund, O. (2000), A new class of extremal composites. *J. Mech. Phys. Solids*, 48, pp. 397-428.
- Sigmund, O. (2001), A 99 line topology optimisation code written in Matlab. *Struct Multidisc Optim*, 21: 120-127.

- Smit, R.J.M., Brekelmans, W.A.M. e Meijer, H.E.H. (1998), Prediction of the mechanical behaviour of nonlinear heterogeneous systems by multi-level finite element modelling. *Comput Meth Appl Mech Engrg*, 155, 181-192.
- Soborková, E., Hubrá A., Kiefman, J. e Sobotka, Z. (1988), Rheological behavior of bone marrow. *Rheologica Acta (Suppl.)*, 26, 467-469.
- Sokolowski, J. e Zochowski, A. (1999), On the topological derivative in shape optimisation. *Siam J Control Optim* 37: 1251-1272.
- Steven, G.P., Li, Q. e Xie, Y.M. (2002), Multicriteria optimisation that minimizes maximum stress and maximizes stiffness. *Comput Struct*, 80:2433-88.
- Stolk, J., Verdonchot, N. e Huiskes, R. (2001), Hip-joint and abductor-muscle forces adequately represent in vivo loading of a cemented total hip reconstruction. *Journal of Biomechanics*, 34, 917-926.
- Sutherland, L.S., Shenoi, R.A. e Lewis, S.M. (1999), Size and scale effects in composites: I. Literature review. *Composites Science and Technology*, 59, 209-220.
- Suzuki, K. e Kikuchi, N. (1991), A homogenisation method for shape and topology optimisation. *Comput Meth Appl Mech and Eng.* 93, 291-318.
- Svanberg, K. (1987), The method of moving asymptotes - a new method for structural optimisation. *Int J Num Meth in Engrg*, 24: 359-373.
- T**antikom, K., Aizawa, T. e Mukai, T. (2005), Symmetric and asymmetric deformation transition in the regularly cell-structured materials. Part I: experimental study. *Int J of Solids and Structures*, 42, 2199-2210.
- Tavares, V, Canhão, H., Gomes, J., Simões, E., Romeu, J., Coelho, P., Santos, R., Malcata, A., Araújo, D., Vaz, C. e Branco, J. (2007), Recomendações para o diagnóstico e terapêutica da osteoporose. *Sociedade Portuguesa de Reumatologia e Sociedade Portuguesa de Doenças Ósseas Metabólicas. Acta Reum Port*, 32, 49-59.
- Taylor, M.E., Tanner, K.E., Freeman, M.A.R. e Yettram, A.L. (1996), Stress and strain distribution within the intact femur: compression or bending? *Med. Eng. Phys*, 18, 2, 122-131.
- Taylor, D. e Lee, T.C. (2003), Microdamage and mechanical behavior: predicting failure and remodeling in compact bone. *Journal of Anatomy*, 203, 203-211.
- Taylor, D., Casolari, E. e Bignardi, C. (2004), Predicting stress fractures using a probabilistic model of damage, repair and adaptation. *Journal of Orthopaedic Research* 22, 487-494.

- Terada, K. e Kikuchi, N. (1998), Characterization of the mechanical behaviors of solid-fluid mixture by the homogenisation method. *Comput. Meth Appl Mech Engrg*, 153, 223-257.
- Terada, K., Hori, M., Kyoya, T. e Kikuchi, N. (2000), Simulation of the multi-scale convergence in computational homogenization approaches. *Int J of Solids and Structures*, 37, 2285-2311.
- Terada, K. e Kikuchi, N. (2001), A class of general algorithms for multiscale analyses of heterogeneous media. *Comput Meth Appl Mech Engrg*, 190, 5427-5464.
- Thomas, H., Zhou, M. e Schramm, U. (2002), Issues of commercial optimization software development. *Struct Multidisc Optim*, 23, 97-110.
- Tsubota, K., Suzuki, Y., Yamada, T., Hojo, M., Makinouchi, A. e Adachi, T. (2009), Computer simulation of trabecular remodeling in human proximal femur using large-scale voxel FE models: Approach to understanding Wolff's law. *Journal of Biomechanics*, 42: 1088-1094.
- Vacanti, J. P. e Langer, R. (1999), Tissue engineering: the design and fabrication of living replacement devices for surgical reconstruction and transplantation. *Lancet*, 354 p. SI32-SI34.
- Vacanti, C.A. e Bonassar, L.J. (1999), An overview of tissue engineered bone. *Clinical Orthopaedics and Related Research*, 367S, S375-S381.
- Valiveti, D.M. e Ghosh, S. (2007), Morphology based domain partitioning of multi-phase materials: a preprocessor for multi-scale modelling. *Int J Num Meth Eng*, 69:1717-1754.
- Vemaganti, K. e Lawrence, W.E. (2005), Parallel methods for optimality criteria-based topology optimization", *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 194, 3637-3667.
- Viceconti, M., Casali, M., Massari, B., Cristofolini, L., Bassini, S. e Toni, A. (1996), The "Standardized Femur Program" Proposal for a Reference Geometry to be Used for The Creation of Finite element Models of the Femur. *Journal of Biomechanics*, 29, 1241.
- Voigt, W. (1889), Uber die beziehung zwischen den beiden elastizitatskonstanten isotroper korper. *Wied Ann*, 38, 573-587.
- Xie, Y.M. e Steven, G.P. (1993), A simple evolutionary procedure for structural optimisation, *Comput. Struct.* 49, 885-896.
- Xie, Y.M. e Steven, G.P. (1997), *Evolutionary structural optimisation*. Springer: Berlin.
- Yan, J., Cheng, G. e Liu, S. (2008), Concurrent material and structural optimisation of hollow plate with truss-like material. *Struct Multidisc Optim*, 35:153-163.

- Z**aoui, A. (1987), In homogenisation techniques for composite media. Lecture notes in Physics, Vol 272. Springer, Berlin.
- Zhang, W. e Sun, S. (2006), Scale-related topology optimisation of cellular material and structures. *Int J Num Meth Eng*, 68:993-1011.
- Zhou, M., Shyy, Y.K. e Thomas, H.L. (2001), Checkerboard and minimum member size control in topology optimisation. *Struct Multidisc Optim*, 21, 152-158.
- Zienkiewicz, O.C. e Campbell, J.S. (1973), Shape optimisation and sequential linear programming, in: R.H. Gallagher, O.C. Zienkiewicz (Eds.), *Optimal Structural Design*, Wiley, New York, pp. 109-126.
- Zohdi, T.I., Oden, J.T. e Rodin, G.J. (1996), Hierarchical modelling of heterogeneous bodies. *Comput Meth Appl Mech Engrg*, 138, 273-298.
- W**alther, F. e Mattheck, C. (1993), Local stiffening and sustaining of shell structures by SKO and CAO, *Procedures of the International Conference in Structural Optimization*, Southampton, UK.
- Wang, L., Fritton, S.P., Weinbaum S. e Cowin S.C. (2003a), On bone adaptation due to venous stasis, *J. Biomechanics*, Vol. 36, pp.1439-1451.
- Wang, M.Y., Wang, X.M. e Guo, D.M. (2003b), A level set method for structural topology optimisation. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 192:227-246.
- Wang, X., Wang, M.Y. e Guo, D. (2004), Structural shape and topology optimisation in level-set-based framework of region representation. *Struct Multidisc Optim*, 27:1-19.
- Wang, S., Sturler, E. e Paulino, G.H. (2007), Large-scale topology optimization using preconditioned Krylov subspace methods with recycling. *Int J Num Meth Engrg*, 69, 2441-2468.
- Ward, F.O. (1838), *Outlines of human osteology*. Published in London, England.
- Weinans, H., Huiskes, R. e Grootenboer, H.J. (1992), The behavior of adaptive bone-remodeling simulation models. *Journal of Biomechanics* 25, 1425-1441.
- Wolff, J. (1870), *Über die imere architektur der knochen und ihre bedeurung für die frage von knochenwachstum*. *Virchows Archive on Pathological Anatomy*, 50: 389-450.
- Wolff, J. (1986), *The law of bone remodelling (Das Gesetz der Transformation der Knochen, Hirschwald, 1892)*. Translated by Maquet, P. and Furlong, R. Springer, Berlin.

Anexo A

Resultados do capítulo 6

Tabela A.1. Microestruturas em cada um dos elementos seleccionados na figura 6.39 e para diferentes valores do parâmetro k (diferentes percentagens de fracção volúmica global).


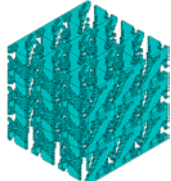
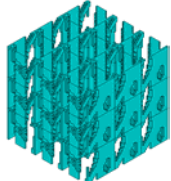
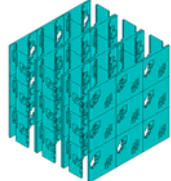
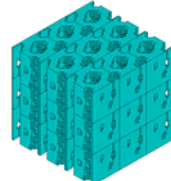
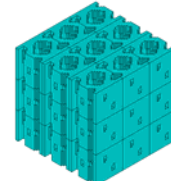
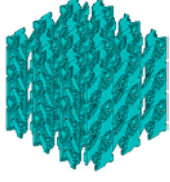
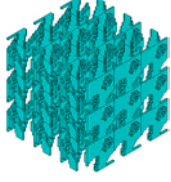
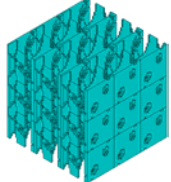
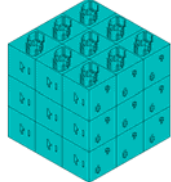
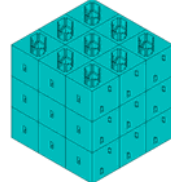
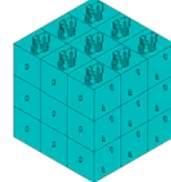
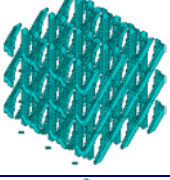
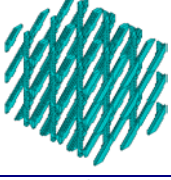
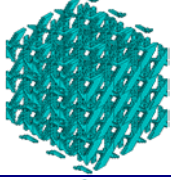
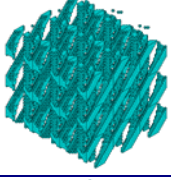
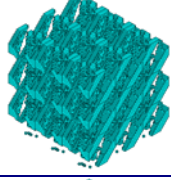
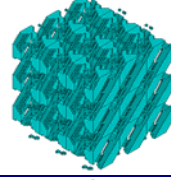
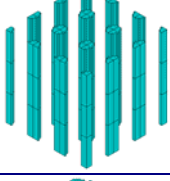
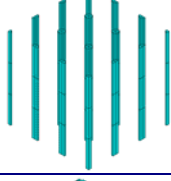
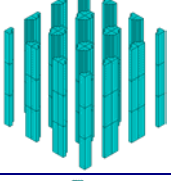
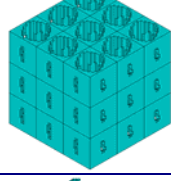
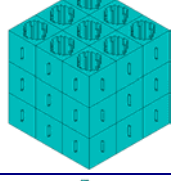
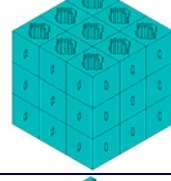
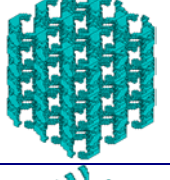
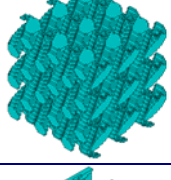
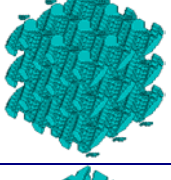
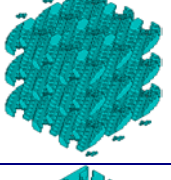
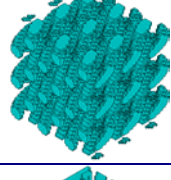
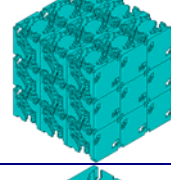
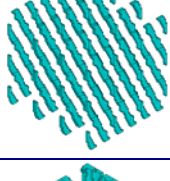
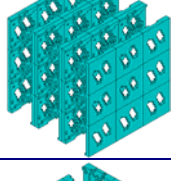
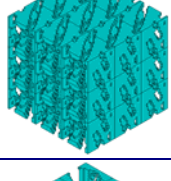
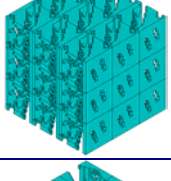
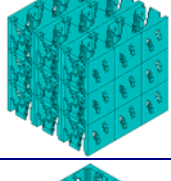
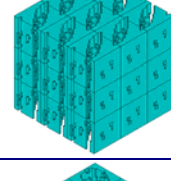
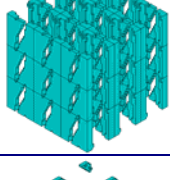
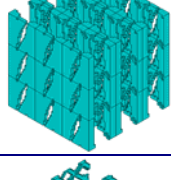
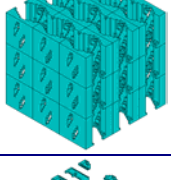
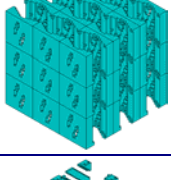
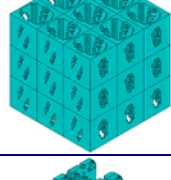
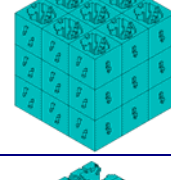
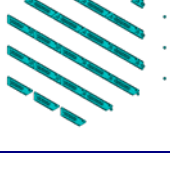
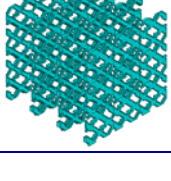
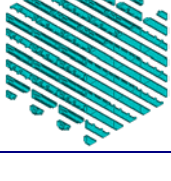
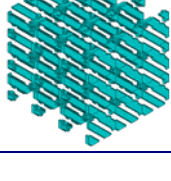
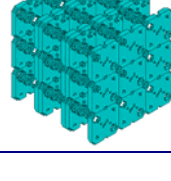
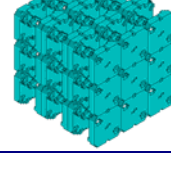
Elem	35%	40%	45%	50%	55%	60%
727						
768						
774						
857						
862						
864						
881						
924						

Tabela A.1. (continuação) Microestruturas em cada um dos elementos seleccionados na figura 6.39 e para diferentes valores do parâmetro k (diferentes percentagens de fracção volúmica global).

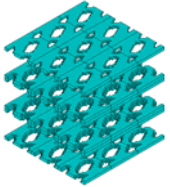
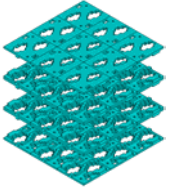
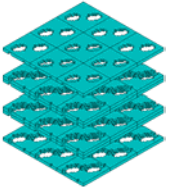
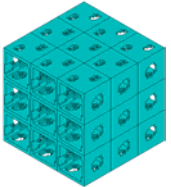
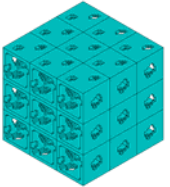
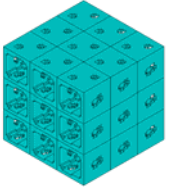
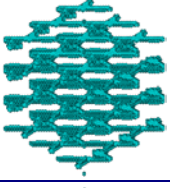
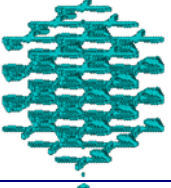
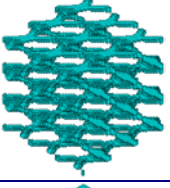
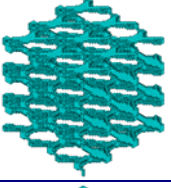
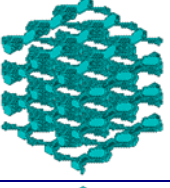
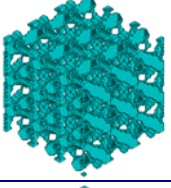
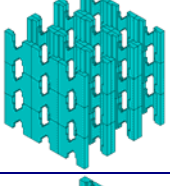
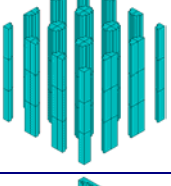
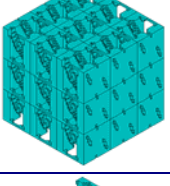
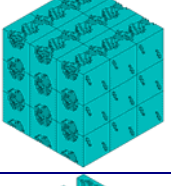
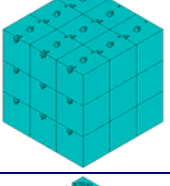
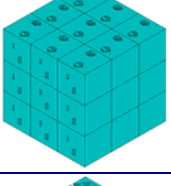
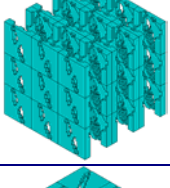
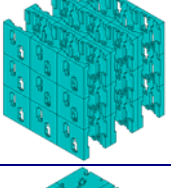
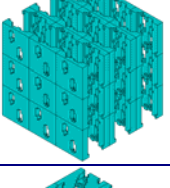
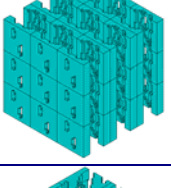
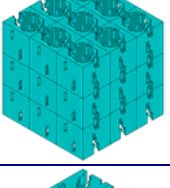
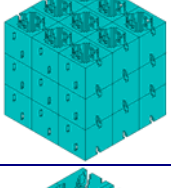
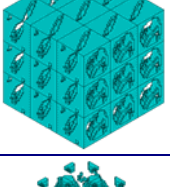
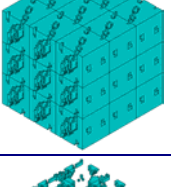
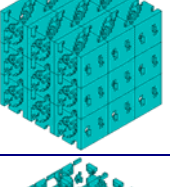
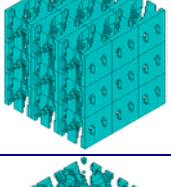
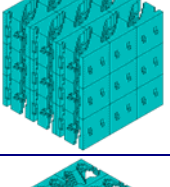
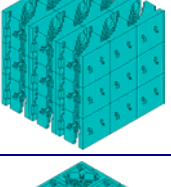
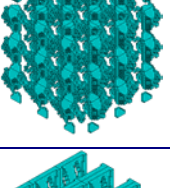
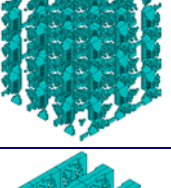
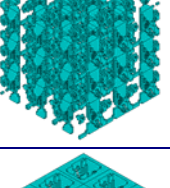
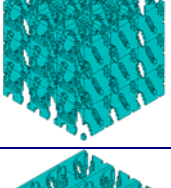
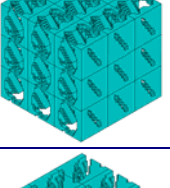
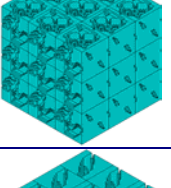
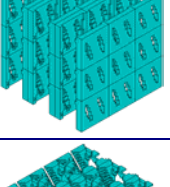
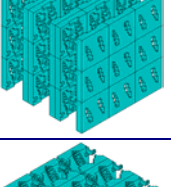
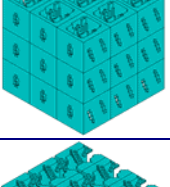
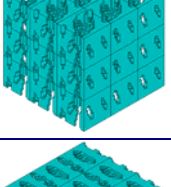
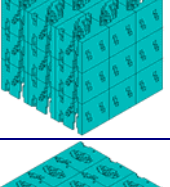
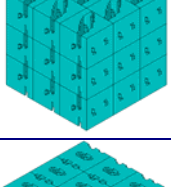
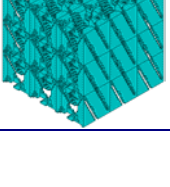
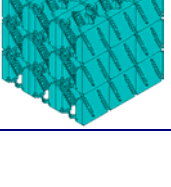
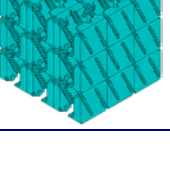
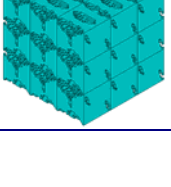
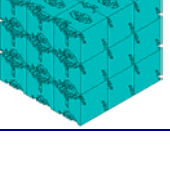
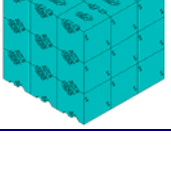
Elem	35%	40%	45%	50%	55%	60%
1190						
1204						
1242						
1707						
1753						
1776						
1789						
1803						

Tabela A.1. (continuação) Microestruturas em cada um dos elementos seleccionados na figura 6. 39 e para diferentes valores do parâmetro k (diferentes percentagens de fracção volúmica global).

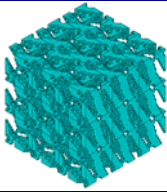
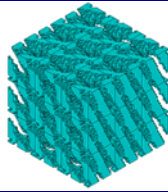
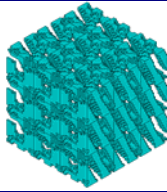
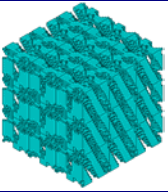
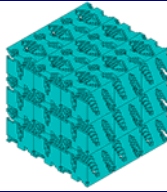
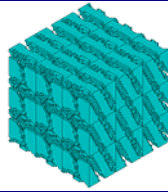
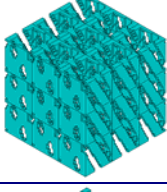
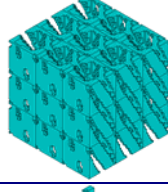
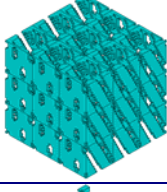
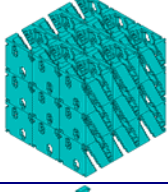
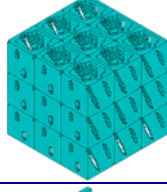
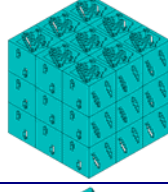
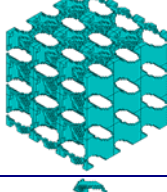
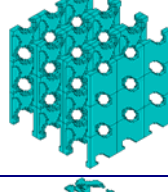
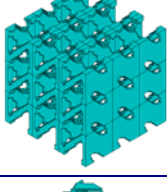
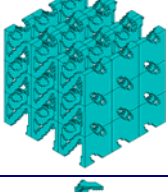
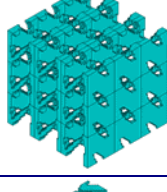
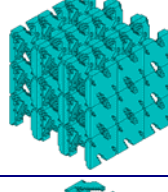
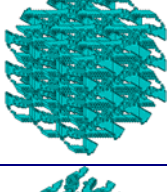
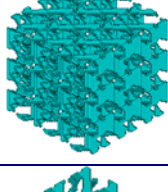
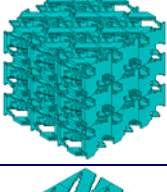
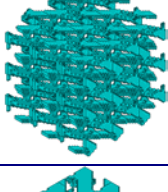
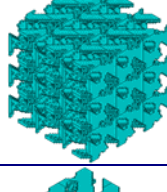
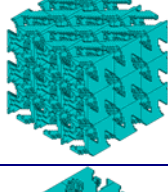
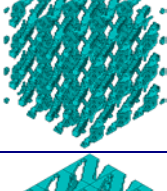
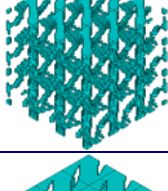
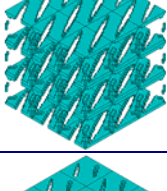
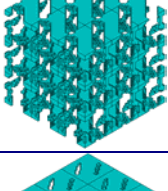
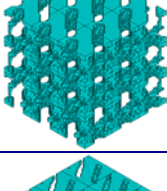
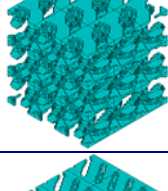
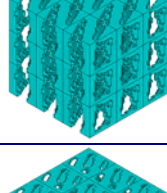
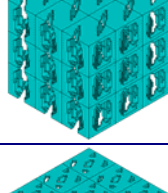
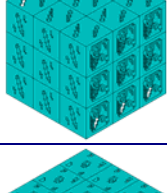
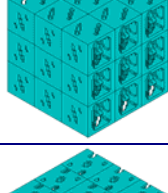
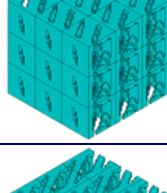
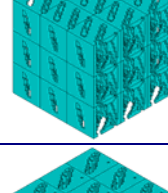
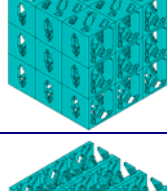
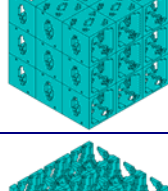
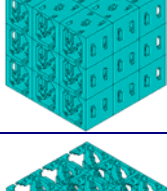
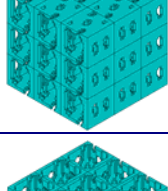
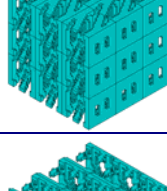
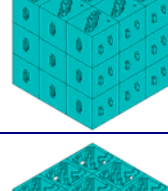

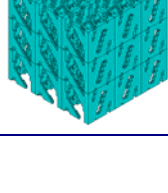
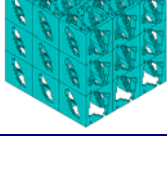
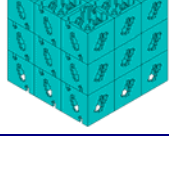
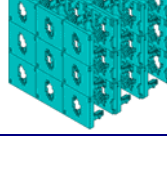
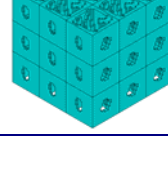
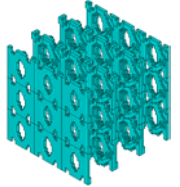
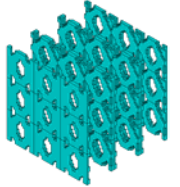
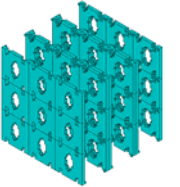
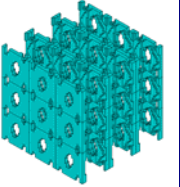
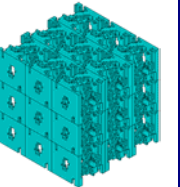
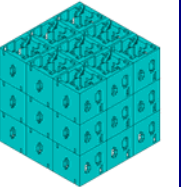
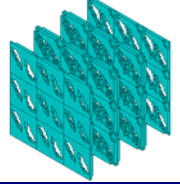
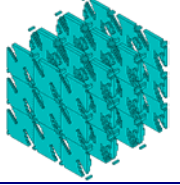
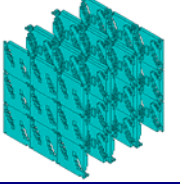
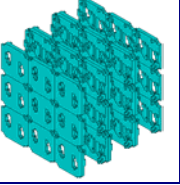
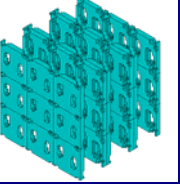
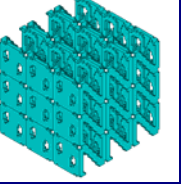
Elem	35%	40%	45%	50%	55%	60%
1827						
1837						
1852						
1859						
1923						
1955						
2004						
2007						

Tabela A.1. (continuação) Microestruturas em cada um dos elementos seleccionados na figura 6. 39 e para diferentes valores do parâmetro k (diferentes percentagens de fracção volúmica global).

Elem	35%	40%	45%	50%	55%	60%
2031						
2057						

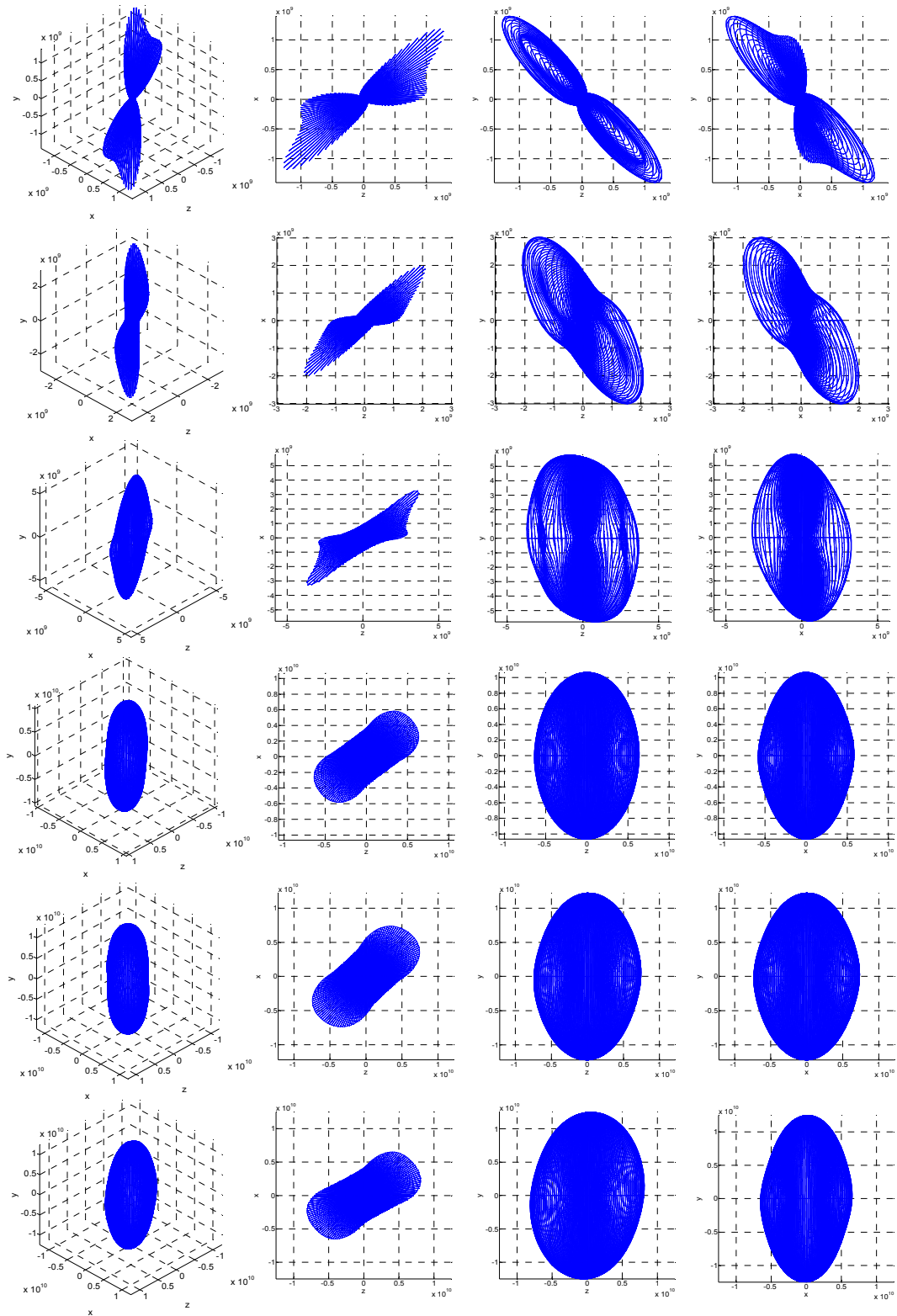


Figura A.1. Gráficos de anisotropia para microestrutura do elemento 768. De cima para baixo valores de k para as frações volúmicas de 35%, 40%, 45%, 50%, 55% e 60%. Da esquerda para a direita, perspectiva isométrica e vistas laterais (planos cartesianos).

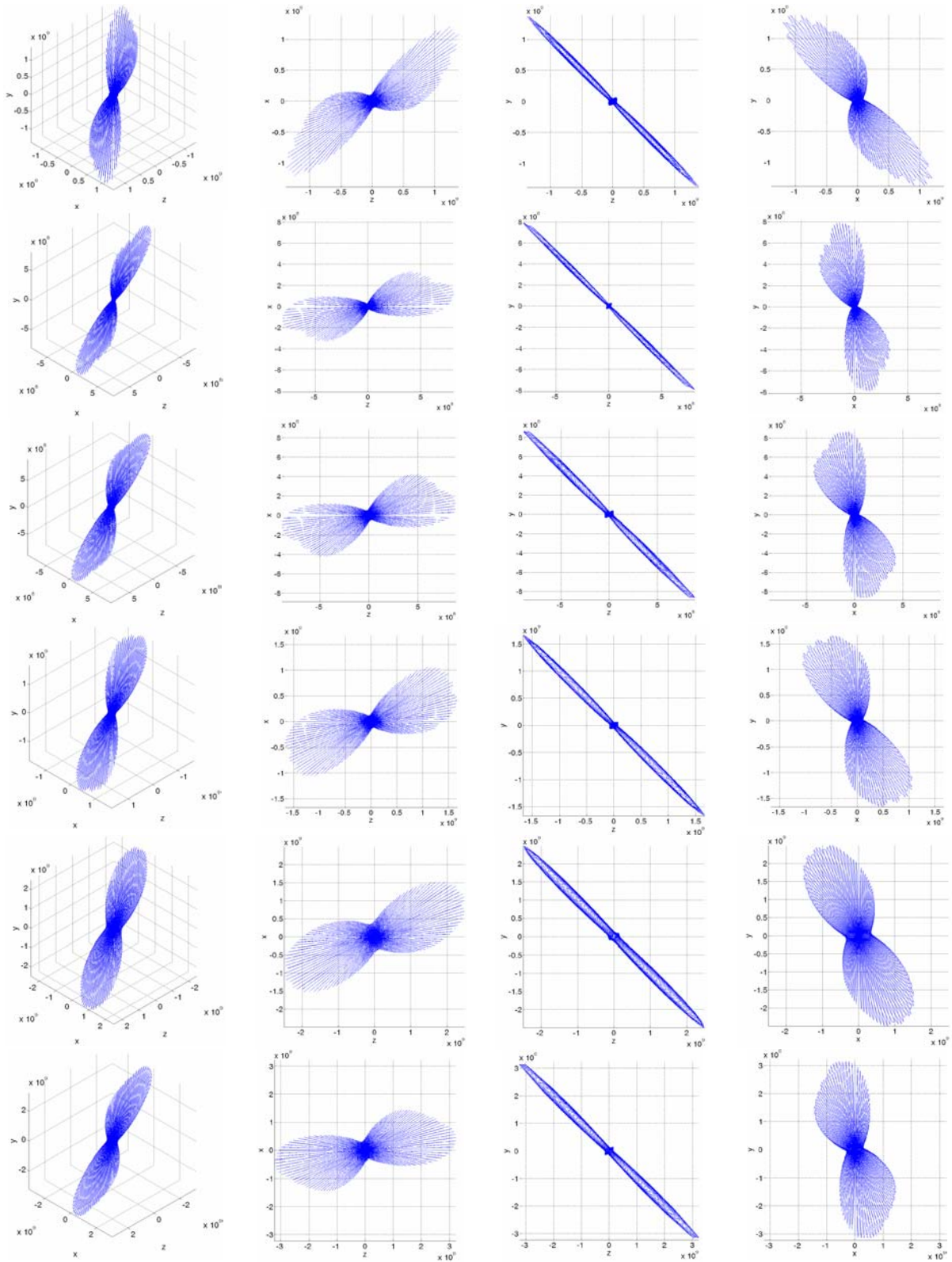


Figura A.2. Gráficos de anisotropia para microestrutura do elemento 774. De cima para baixo valores de k para as fracções volúmicas de 35%, 40%, 45%, 50%, 55% e 60%. Da esquerda para a direita, perspectiva isométrica e vistas laterais (planos cartesianos).

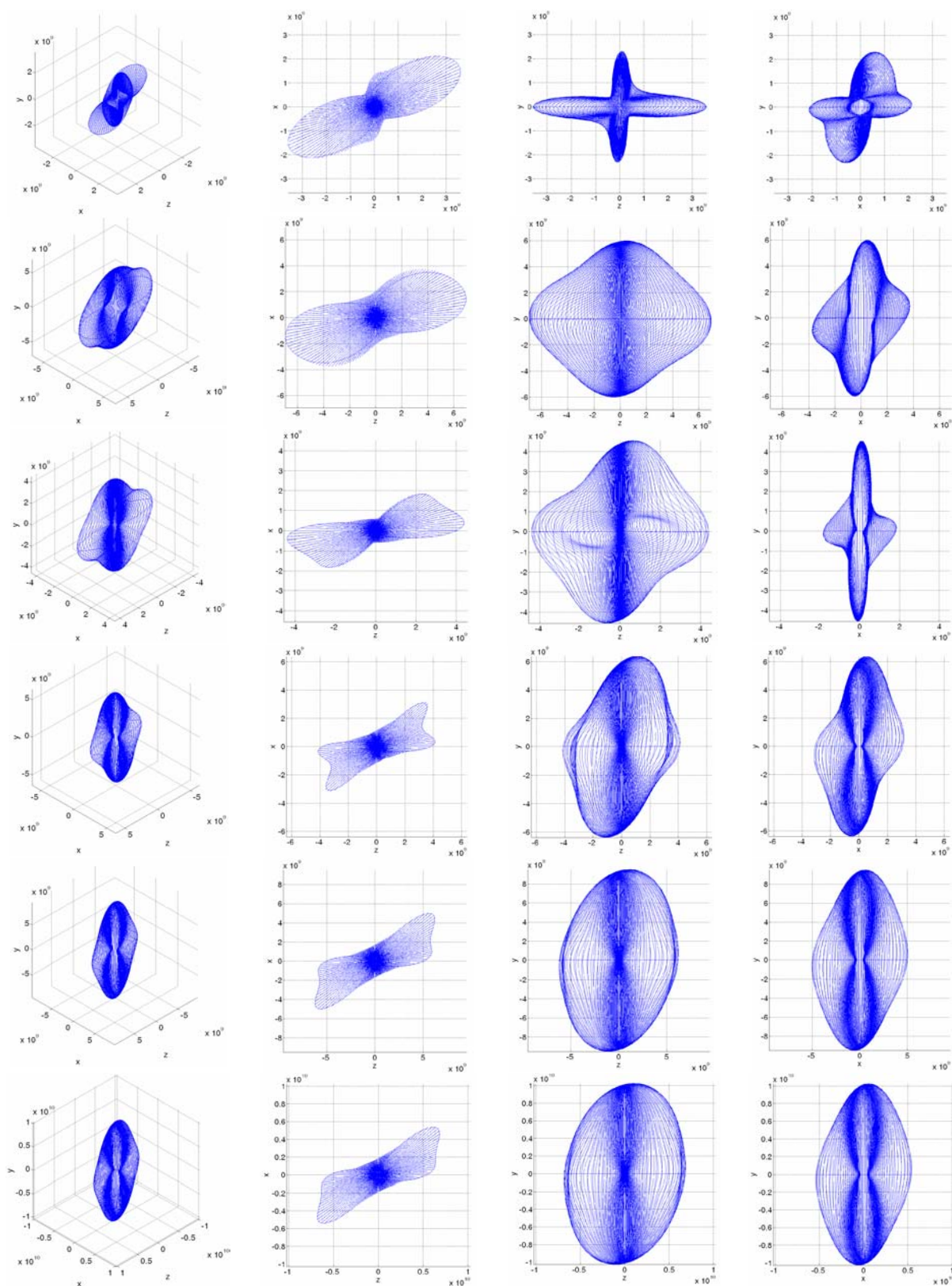


Figura A.3. Gráficos de anisotropia para microestrutura do elemento 1753. De cima para baixo valores de k para as fracções volúmicas de 35%, 40%, 45%, 50%, 55% e 60%. Da esquerda para a direita, perspectiva isométrica e vistas laterais (planos cartesianos).

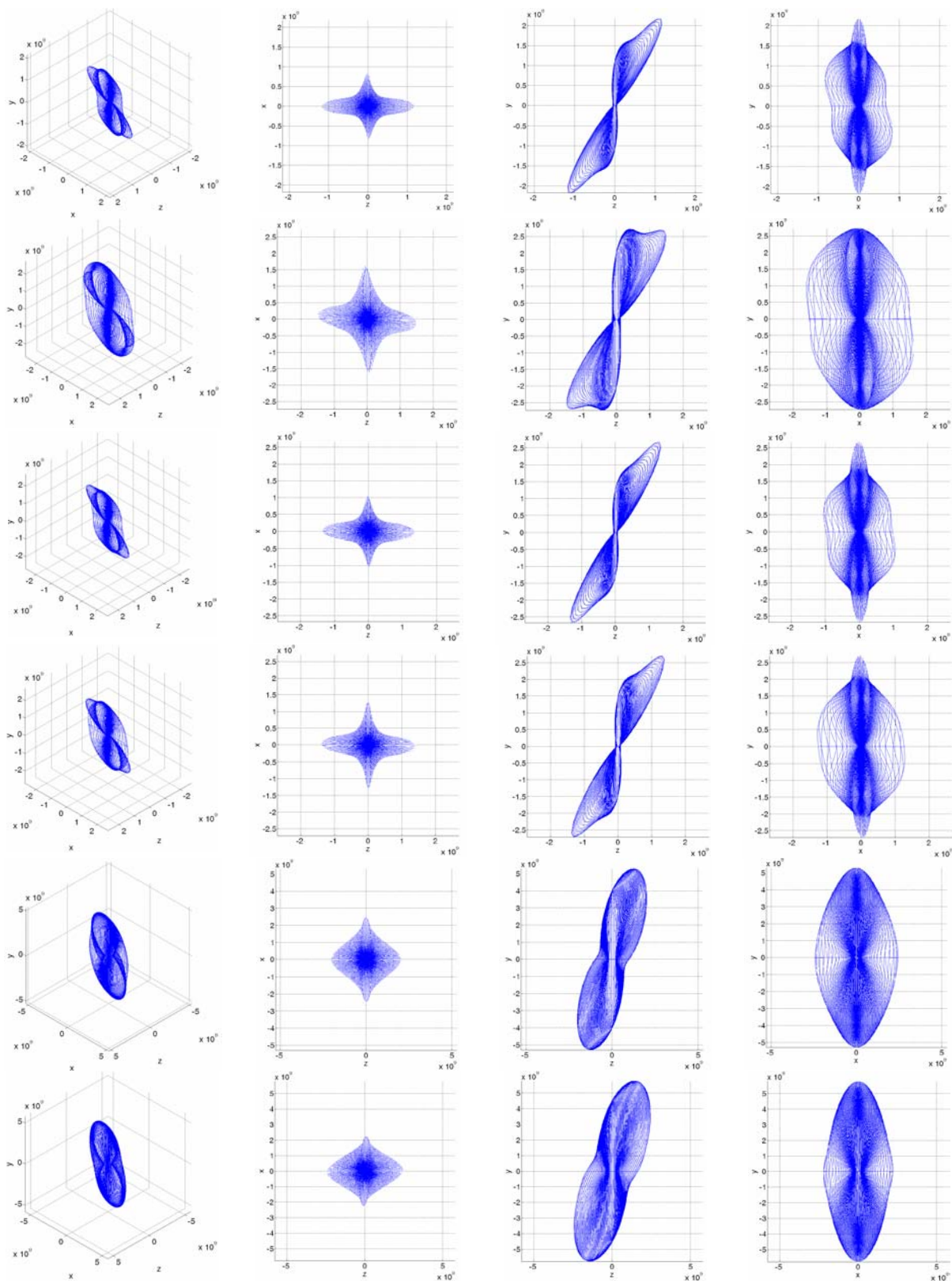


Figura A.4. Gráficos de anisotropia para microestrutura do elemento 1837. De cima para baixo valores de k para as frações volúmicas de 35%, 40%, 45%, 50%, 55% e 60%. Da esquerda para a direita, perspectiva isométrica e vistas laterais (planos cartesianos).

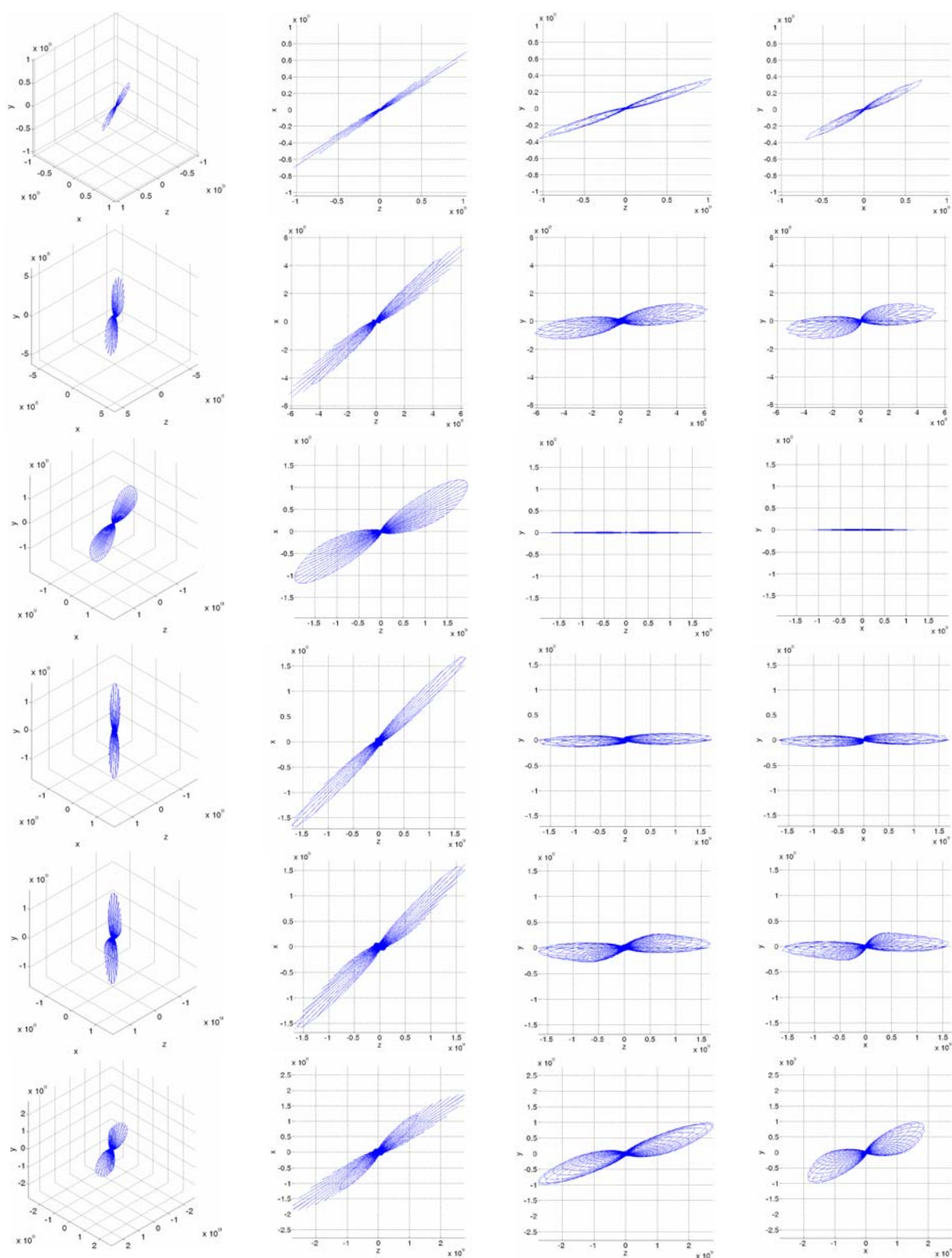


Figura A.5. Gráficos de anisotropia para microestrutura do elemento 1923. De cima para baixo valores de k para as fracções volúmicas de 35%, 40%, 45%, 50%, 55% e 60%. Da esquerda para a direita, perspectiva isométrica e vistas laterais (planos cartesianos).

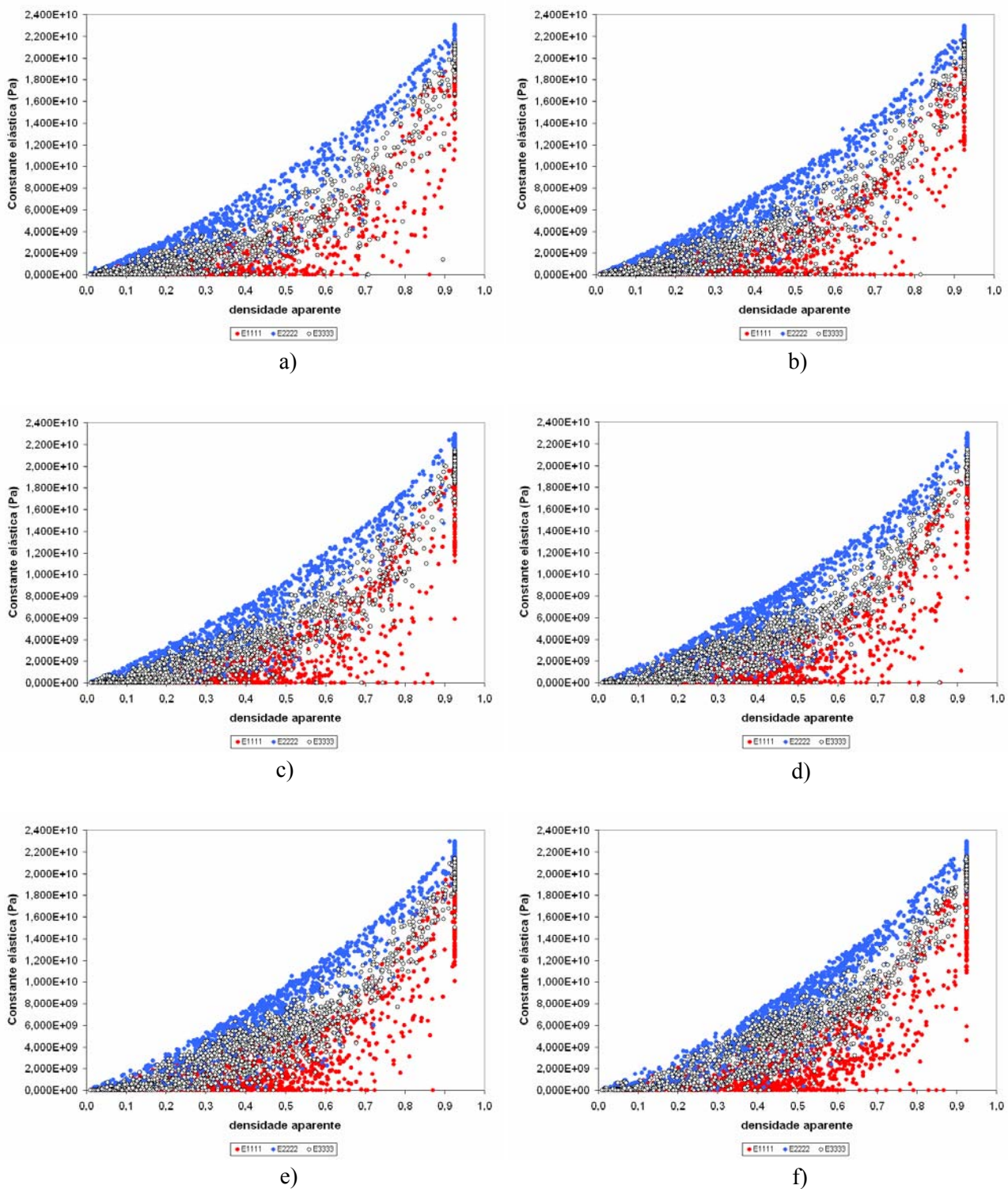


Figura A.6. Representação gráfica das componentes E_{1111}^H , E_{2222}^H e E_{3333}^H do tensor da permeabilidade homogeneizado como função da densidade aparente para diferentes valores da fracção volúmica global (diferentes k 's): a) 35%; b) 40%; c) 45%; d) 50%; e) 55%; f) 60%.

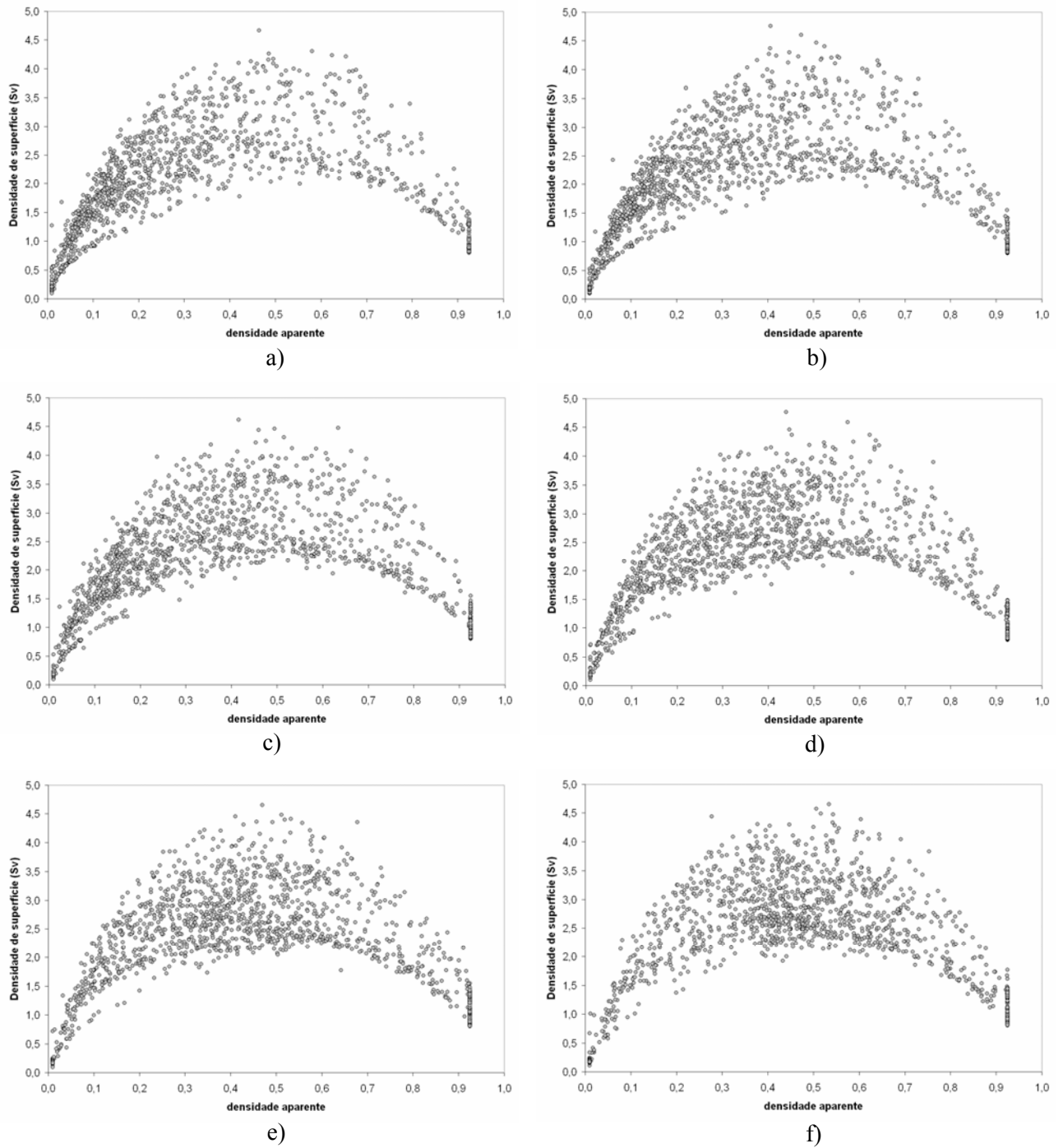


Figura A.7. Representação gráfica da densidade de área de superfície trabecular [mm^2/mm^3] como função da densidade aparente para diferentes valores da fracção volúmica global (diferentes $k's$): a) 35%; b) 40%; c) 45%; d) 50%; e) 55%; f) 60%.

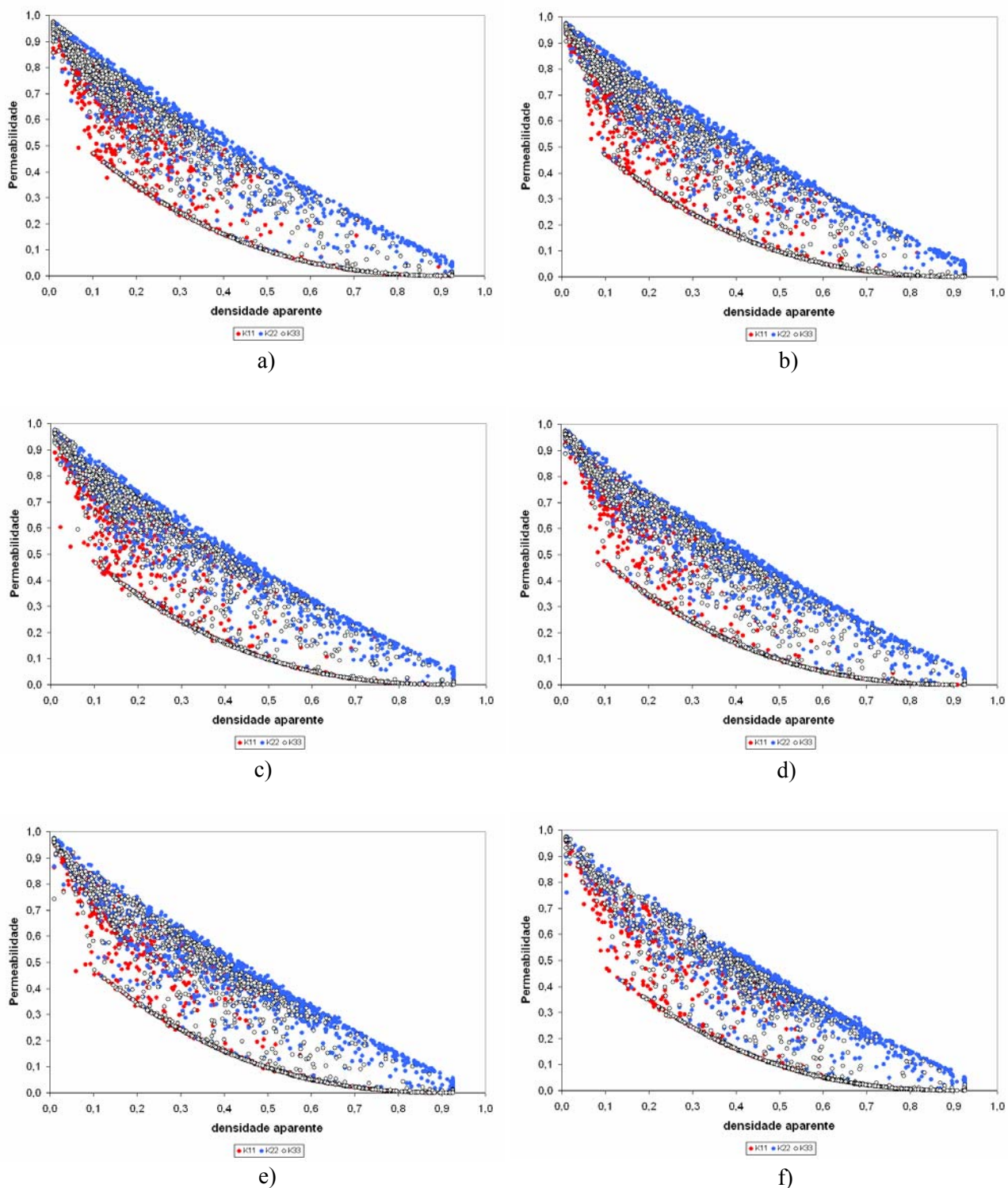


Figura A.8. Representação gráfica das componentes da diagonal do tensor da permeabilidade como função da densidade aparente para diferentes valores da fracção volúmica global (diferentes k 's): a) 35%; b) 40%; c) 45%; d) 50%; e) 55%; f) 60%.

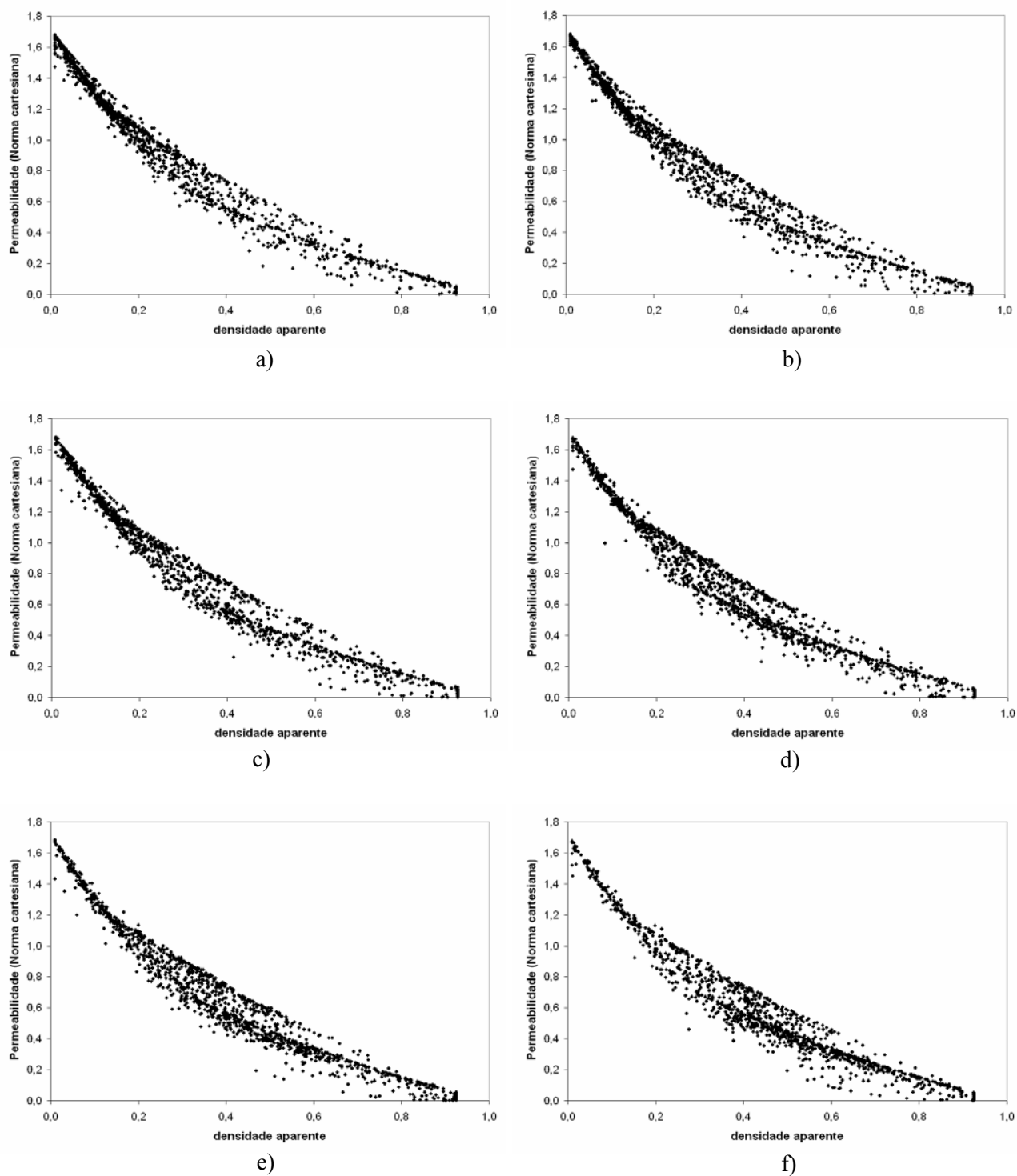
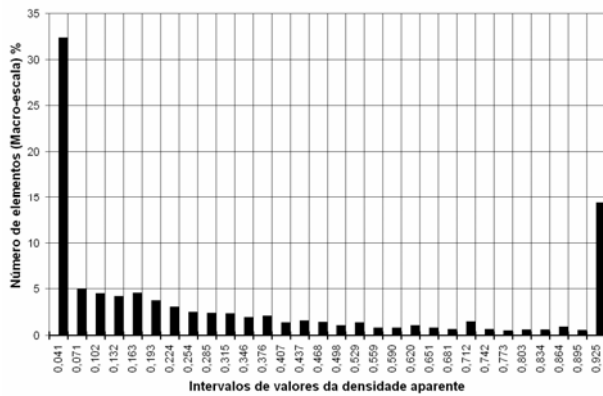
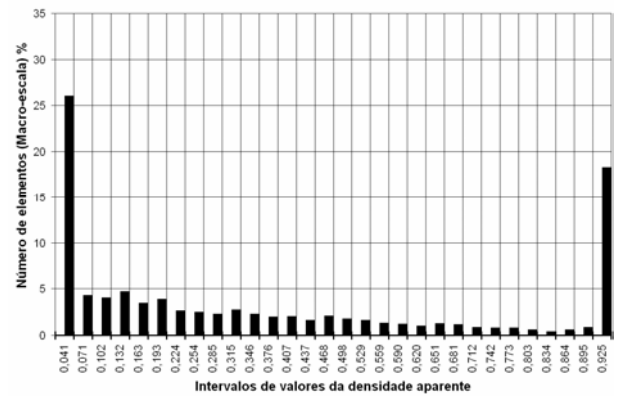


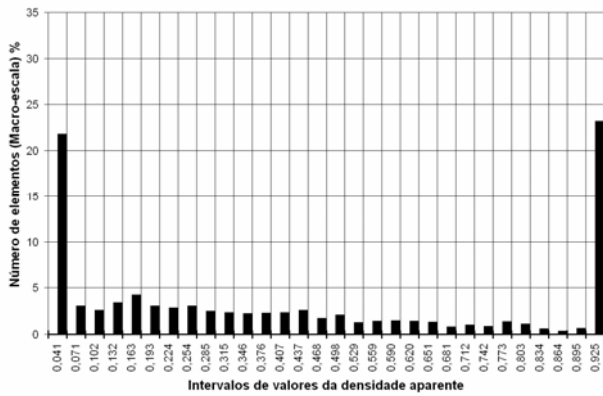
Figura A.9. Representação gráfica da norma das componentes da diagonal do tensor da permeabilidade como função da densidade aparente para diferentes valores da fracção volúmica global (diferentes k 's): a) 35%; b) 40%; c) 45%; d) 50%; e) 55%; f) 60%.



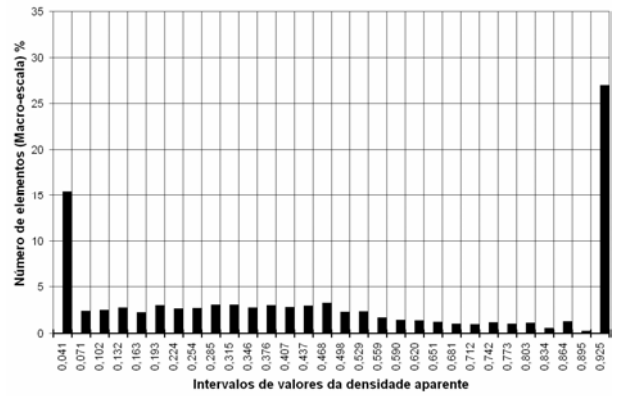
a)



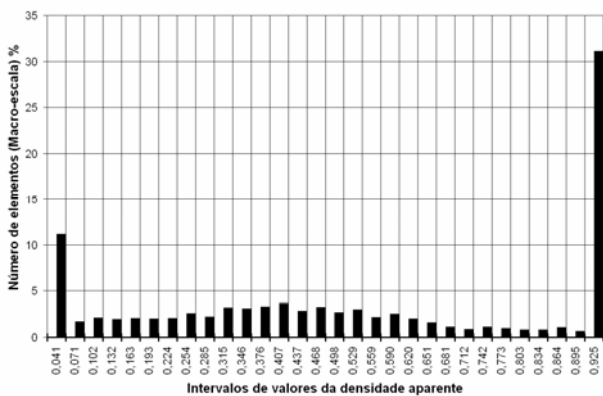
b)



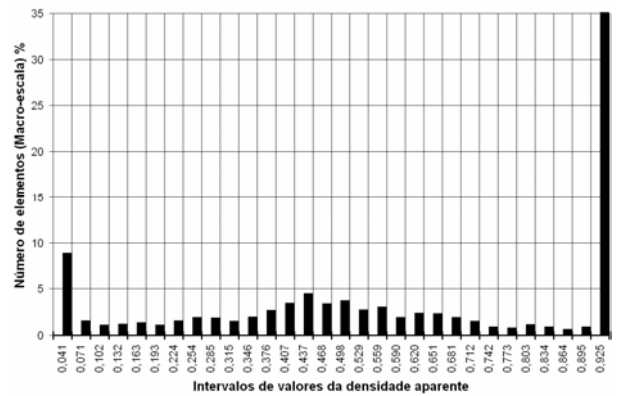
c)



d)



e)



f)

Figura A.10. Representação gráfica do número de elementos finitos macro [%] existentes dentro de cada sub-intervalo da densidade aparente.